G Heiligenthal

Frankfurt a M 1970

Ionisation innerer Schalen im Schwerionenstoß

Inaugural - Dissertation

zur

Erlangung des Doktorgrades der Naturwissenschaften

vorgelegt beim Fachbereich Physik der

Johann Wolfgang Goethe - Universität

zu Frankfurt/Main

von

Gerhard Heiligenthal

aus Frankfurt/Main

Frankfurt/Main

1978

UNIV.
LEIDEN
BIBL.

Gedruckt mit Genehmigung des Fachbereiches Physik

der Johann Wolfgang Goethe Universität

zu Frankfurt am Main

Dekan	: Prof. Dr. Rainer Jelitto
Leiter der Arbeit	: Prof. Dr. Walter Greiner
Erstgutachter	: Prof. Dr. Walter Greiner
Zweitgutachter	: Prof. Dr. Berndt Müller

Tag der mündlichen Prüfung: 25. April 1978

Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41550820_0034

INHALTSVERZEICHNIS

Einleitung

1. Dynamische Ionisationstheorie

1.1 Gründe für die Untersuchung der Ionisation innerer Schalen

1.2 Annahmen

1.3 Quantenmechanische Theorie des SI-Stoßes

1.4 Einfachstoß- und Doppelstoßmechanismus

2. Störungsrechnung

2.1 Anregungen in höhere gebundene Zustände

2.2 Anregungen ins Kontinuum

2.3 Vergleich: Störungsrechnung/gekoppelte Kanäle

3. Die gekoppelten Kanalgleichungen

4. Kopplungsmechanismen

5. Kontinuumsübergänge

6. Wirkungsquerschnitte

7. Ergebnisse und Diskussion

7.1 Allgemeiner Verlauf

7.2 Konvergenzverhalten bei variierender Elektronenanzahl

7.3 Konvergenzverhalten bei variierender Zustandszahl

7.4 Verhalten bei verschiedenen Einschußenergien

7.5 Asymptotisches Verhalten bei verschiedenen Einschußenergien

7.6 Verhalten bei verschiedenen Stoßparametern

7.7 Asymptotisches Verhalten bei verschiedenen Stoßparametern

7.8 Konfigurationsamplituden; Doppel- und Einzelstoß

7.9 Wirkungsquerschnitte

7.10 Anregungen ins Kontinuum

7.11 Die Rotationskopplung

8. Ausblick

Zusammenfassung

Anhänge

A Die Coulomb-Trajektorie

B Matrixelemente verschiedener Konfigurationen

C Hammings Prediktor-Korrektor Methode

D Programmaufbau

Literaturverzeichnis

Figurenbeschreibung

Figuren

Danksagung

Lebenslauf

Einleitung

Bei hochenergetischen Schwerionenstößen unterhalb der Coulomb Barriere kommt es während der Annäherung der beiden Schwerionen zu einer Umordnung der atomaren Orbitale der Stoßpartner und schließlich im Bereich größter Annäherung zur kurzzeitigen Ausbildung molekularer Orbitale, welche im auslaufenden Kanal dann wieder aufgebrochen werden.

Auf die Möglichkeit der Existenz von superschweren Quasimolekülen wurde zuerst von W. Greiner, B. Müller und J. Rafelski während der GSI Seminare (1969 -1970) hingewiesen und von J. Rafelski, L. P. Fulcher und W. Greiner zuerst in Phys. Rev. Letters 27 (1971) 958 veröffentlicht.

Ein Nachweis für die Ausbildung molekularer Orbitale im Schwerionenstoß ist die, je nach Stoßsystem, dominante K-, L- oder M-Strahlung (Ref. 1,2,3,4,5,6,7,8,9). Für die theoretische Berechnung der Molekularstrahlung sei auf die Literatur verwiesen (Ref. 10,11,12).

Damit es zur Aussendung von Strahlung kommt, müssen die Niveaus, auf die die Strahlung erfolgen soll, leer sein. Leere Schalen können einmal durch vorher ionisierte bzw. angeregte Atome in den Schwerionen-Stoß gebracht werden, zum anderen gibt es während des Stoßes Kopplungsmechanismen, die die unteren Elektronenbahnen entvölkern können.

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit der K-Produktion im SI-Stoß. Es werden zwei Stoßysteme, U-U und Pb-Pb, untersucht. Zwei Kopplungsmechanismen, die Radial- und die Rotationskopplung, werden berücksichtigt. Anregungen ins obere Kontinuum werden ebenfalls betrachtet. Die daraus resultierenden Wahrscheinlichkeitsamplituden werden im

Formalismus der gekoppelten Kanäle (coupled channels) berechnet. Für die unteren Anregungen werden Vergleiche mit der Störungsrechnung angegeben (Ref 13).

Die K-Loch Wahrscheinlichkeiten werden für verschiedene Anzahlen von gebundenen Zuständen mit variierenden Elektronenbesetzungen berechnet. Außerdem wurde die Abhängigkeit von Einschußenergie und Stoßparameter auf die Ionisation betrachtet. Die Wirkungsquerschnitte der K-Loch Anregungen wurden für verschiedene Elektronenkonfigurationen berechnet.

1. DYNAMISCHE IONISATIONSTHEORIE

1.1 Gründe für die Untersuchung der Ionisation innerer Schalen

a) Die Stoßparameterabhängigkeit der Ionisationswahrscheinlichkeit hängt direkt zusammen mit der elektronischen Bindungsenergie E 1sσ in superschweren Kernen am Punkte größter Kernannäherung. Darauf gründet sich die Möglichkeit der Spektroskopie von elektronischen Zuständen bis Z=190. Das entspräche einem System U-Cf (Ref 16,17).

b) Bei Systemen mit einer Gesamtladung von Z = Z1 + Z2 größer als 172 taucht das 1sσ Niveau in die negative Dirac-See ein. Beim U-U System (Z = 184) ist dies bei einem internuklearen Abstand von weniger als 35 fm der Fall. Bei Anwesenheit eines Loches in der K-Schale zerfällt dann das neutrale Vakuum unter dem Einfluß des überkritischen elektrischen Feldes unter Aussendung eines Elektron-Positron Paares (Ref 18, 19,20). Dieses neue Phänomen würde einen guten Test für die QED starker Felder darstellen.

c) Werden während des Stoßprozesses Löcher in die K-Schale gebracht, so können diese wieder von höher liegenden Elektronen unter Aussendung von Strahlung aufgefüllt werden, z.B. von 2sσ , 2p 1/2 σ , 2p 3/2σ, 2p 3/2 π etc Elektronen (Ref 16). Die Frequenz dieser Strahlung und ihre Winkelverteilung würden eine Spektroskopie dieser molekularen Zustände erlauben.

d) Im SI-Stoß entsteht durch die Bewegung der Kerne außer einem elektrischen Feld auch ein starkes magnetisches Feld (Ref 16). Dies bewirkt im einfachsten Fall eine Aufspaltung

der entarteten Spin-1/2 Zustände

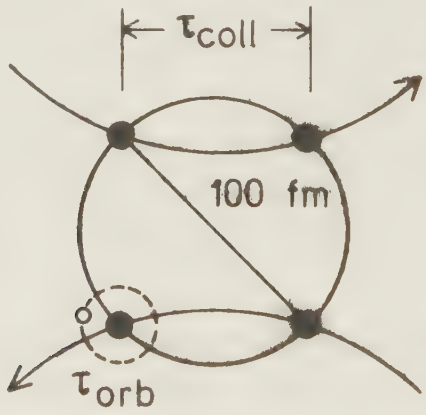
$$(E\ 1s\ (\uparrow) - E\ 1s\ (\downarrow)) \sim 100\ keV$$

(Ref 20). Die Energiedifferenz zweier magnetischer Unterzustände wird zu einem Unterschied in der Ionisierungswahrscheinlichkeit für die beiden Zustände führen. Die Polarisation der molekularen K-Strahlung wird daher abhängen von dem Ionisierungsmechanismus der molekularen Zustände. Mit ihrer Hilfe könnten zum einen Magnetfelder von mehr als 10**14 Gauss untersucht werden, zum anderen könnte damit die theoretische Behauptung, daß ein Großteil der Ionisation bei kleinen Abständen stattfindet, experimentell untermauert werden. Das Festhalten der Achse des molekularen magnetischen Feldes macht ein Koinzidenz-Experiment nötig.

1.2 Annahmen

Nachdem 1969 von Greiner et al auf die Möglickeit der Existenz von superschweren Elementen hingewiesen wurde (Ref 14), suchte man in den nächsten Jahren nach einer Methode, solche Elemente nachzuweisen, bzw. derartige Supermoleküle für eine kurze Zeitspanne zu simulieren, um ihr Verhalten studieren zu können. Der Abstand zwischen den beiden Ionen muß dabei um ein wesentliches kleiner sein als der zum Stoßystem gehörende K-Schalenradius $\sqrt{\langle r_{1s}^2 \rangle}$. Schießt man Uran auf Uran, so muß die größte Kernannäherung weniger als 650 fm betragen, bevor es zur Bildung molekularer Innenschalen kommt. Kommen die Urankerne im einlaufenden Kanal auf 100 fm zusammen, so brauchen sie zum Erreichen des gleichen Abstandes im auslaufenden Kanal ungefähr

$\tau_{coll} \approx$ 1.8 x 10**-19 sec (R min $\approx$ 20 fm).



Nimmt man eine Umlaufgeschwindigkeit des K-Schalen Elektrons von 0.5*c an, so beträgt das Verhältnis von Stoßzeit und Umlaufzeit $\tau_{coll} : \tau_{orb}$ ungefähr 20. Das bedeutet, daß die Elektronen genügend Zeit haben, sich auf die veränderten Bedingungen, d.h. der Überlagerung der Orbitale, einzustellen. Die K-Schalen Elektronen gehören dann nicht mehr zu dem einen oder anderen Ion, sondern umkreisen auf einem Molekülorbital das superschwere System mit Z = 184.

Die adiabatische Kernbewegung erleichtert die theoretische Beschreibung des Stoßes, da die Born-Oppenheimer Näherung anwendbar ist, und die Kern- und Elektronenbewegungen separieren. J. Rafelski et al (Ref 15) beschäftigte sich mit der Adiabatiziät der Elektronenbewegung.

Das Kern-Coulomb Feld wird die Bahn eines geladenen Teilchens mehr oder weniger stark beeinflußen. Ein Maß für die Stärke dieser Bahnmodifikation ist die dimensionslose Sommerfeldzahl η :

1.1.1 $$\eta = \frac{Z_1 \cdot Z_2 \cdot e^2}{\hbar v} = \frac{R_{min}}{\lambda\!\!\!^{-}}$$

Wie im rechten Teil der Definitionsgleichung angedeutet, kann man sich η vorstellen als das Verhältnis vom halben Abstandes größter Kernannäherung bei Stoßparameter b = 0 : R min = $Z_1 \cdot Z_2 \cdot e^2 / E_{cm}$ zur entsprechenden de Broglie Wellenlänge des Projektils im Unendlichen:

$$\lambda\!\!\!^{-} = \frac{\hbar}{p} = \frac{\hbar}{m_p \cdot v} \qquad \text{(mit E cm = } 0.5\, m_p v^2\text{)}$$

Ist η << 1, so wird das Coulomb Feld die Wellenfunktion des Projektils nicht maßgeblich verändern, und die Born´sche Näherung ist anwendbar. Gilt jedoch η >> 1, so schirmt der starke, abstoßende Coulomb Einfluß das Geschoß vor den Kernkräften ab. Nur für Stöße oberhalb der Coulomb-Barriere muß dem Einfluß der Kernkräfte Rechnung getragen werden.

Für die Kern-Trajektorie des Projektils läßt sich dann eine klassische Rutherford Hyperbel ansetzen. Verwendet wurde hierbei die folgende Parametrisierung:

1.1.2a $$R = R_{min} \cdot (\varepsilon \cosh x + 1)$$

1.1.2b $$t = \frac{R_{min}}{v_\infty} \cdot (\varepsilon \sinh x + x)$$

Zur ausführlichen Beschreibung der Coulomb Trajektorie sei auf Anhang A verwiesen.

Für das Uran-Uran System ergibt sich bei Geschwindigkeiten von $v/c \approx 0.1$ ein $\eta > 600$. Selbst für das leichtere Blei-Blei System ist immer noch $\eta > 500$.

1.3 Quantenmechanische Theorie des Schwerionen-Stoßes

Im folgenden wollen wir ein Ionenstoßmodell darlegen, mit dessen Hilfe wir Hinweise auf mögliche Reaktionskanäle erhalten (Ref 10, 11).

Die Kernbewegung wird beschrieben durch die Vielteilchen - Schrödinger Gleichung. Wir verwenden, da wir unser System als abgeschlossen betrachten können, nur die stationäre Schrödinger Gleichung. Aus der Stoßdynamik ersehen wir, daß die Quantenzahl des Kerndrehimpulses $\vec{L}$ und der Elektronendrehimpuls $\vec{j}$ nebst ihren Projektionen m und μ nur in der Asymptotik Erhaltungsgrößen sind. Lediglich der Gesamtdrehimpuls $\vec{I} = \vec{L} + \vec{j}$ und seine Projektion M sind gute Quantenzahlen während der gesamten Streuung.

Wir werden nun den totalen Hamiltonoperator in Einzelterme zerlegen, die uns klar die möglichen Kopplungen zwischen Nukleonen, Kernen und Elektronen aufzeigen.

Formell läßt sich der Hamiltonoperator eines bewegten Kernes schreiben als:

1.3.1
$$H = \sum_{i_N} t_{i_N} + \frac{1}{2}\sum_{i_N \neq j_N} V^N_{i_N j_N} + \sum_{i_e} d_{i_e} + \frac{1}{2}\sum_{i_e \neq j_e} V^e_{i_e j_e} + \sum_{i_N j_e} V^{eN}_{i_N j_e}$$
$$= H_N + H_e + H_{eN}$$

Der erste Term beschreibt die Bewegung des gesamten Kernes und der zweite Term berücksichtigt die Wechselwirkung der einzelnen Nukleonen untereinander. Term 3 stellt den freien Dirac Operator für die Bewegung der Elektronen dar, der vierte Term entspricht Term 2 für die Elektronen und der letzte Ausdruck steht für die Nukleon - Elektron Kopplung.

Beim Schwerionen Stoß streuen zwei Teilchen; Kern 1 mit A1 Teilchen und Kern 2 mit A2 Teilchen. Als nächstes einigen wir uns auf ein geeignetes Koordinatensystem zur Beschreibung des Streuprozesses. Hierzu wird das Schwerpunktsystem gewählt. Der Ortsvektor des Schwerpunktes ist dann definiert als

1.3.2a $$\vec{R}_{cm} = \frac{A_1 \cdot \sum_{i_1=1}^{A_1} \vec{r}_{i_1} + A_2 \cdot \sum_{i_2=1}^{A_2} \vec{r}_{i_2}}{A_1 + A_2}$$

Für die Relativkoordinate zwischen den beiden Kernen gilt (Fig 1):

1.3.2b $$\vec{R} = \vec{R}_1 + \vec{R}_2 = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$$

Zwei Tripel innerer Basisvektoren $\vec{\xi}_1$ und $\vec{\xi}_2$ sollen uns die innere Beschreibung der beiden Atome liefern.

Im Schwerpunktsystem tauchen im Hamilton Operator zwei weitere Zusatzterme auf. Sie berücksichtigen die kinetische Energie T cm des Schwerpunktes der Kerne und die kinetische Energie t cm der Elektronen. Letztere ist allerdings wegen der geringen Elektronenmasse vernachlässigbar klein.

Somit haben wir für den Gesamthamiltonoperator:

1.3.3a $$H = H_N + H_e + \sum_{i_{N_1} j_{e_1}} V^{N_1 e_1}_{i_{N_1} j_{e_1}} + \sum_{i_{N_2} j_{e_2}} V^{N_2 e_2}_{i_{N_2} j_{e_2}}$$

1.3.3b $$H_e(\vec{r}) = \sum_{i_{e_1}} d_{i_{e_1}} + \sum_{i_{e_2}} d_{i_{e_2}} + \frac{1}{2} \sum_{i_{e_1} \neq j_{e_1}} V^{e_1}_{i_{e_1} j_{e_1}} + \frac{1}{2} \sum_{i_{e_2} \neq j_{e_2}} V^{e_2}_{i_{e_2} j_{e_2}} + \sum V^{e_1 e_2}_{i_{e_1} j_{e_2}}$$

1.3.3c $$H_N = T_{cm}(R_{cm}) + H_\beta(\vec{\xi}_\beta) + H_{A_1 A_2}(\vec{R}, \vec{\xi}_1, \vec{\xi}_2), \quad \beta = 1, 2$$

Die zwei internen Kernoperatoren $H_\beta(\vec{\xi}_\beta)$ zerfallen in

jeweils drei weitere Glieder. Sie beschreiben die Bewegung der einzelnen Nukleonen und der Elektronen sowie die Nukleon - Nukleon Wechselwirkung.

1.3.3d $$H_\beta(\vec{\xi}_\beta) = \sum_{i_{N\beta}} t_{i_{N\beta}} - T_\beta + \frac{1}{2}\sum_{i_{N\beta} \neq j_{N\beta}} V^N_{i_{N\beta} j_{N\beta}} \quad , \beta = 1,2$$

Der Kopplungsoperator der Nukleonen verschiedener Kerne spaltet in zwei Glieder auf. Davon beschreibt der eine die relative Bewegung der beiden Kerne, und der andere berücksichtigt die Wechselwirkung verschiedener Nukleonen.

1.3.3e $$H_{A_1 A_2}(\vec{R}, \vec{\xi}_1, \vec{\xi}_2) = T_{A_1 A_2}(\vec{R}) + \sum_{i_{N_1} j_{N_2}} V^N_{i_{N_1} j_{N_2}}$$

Die stationäre Schrödinger Gleichung lautet dann:

1.3.4 $$H\Psi = E\Psi$$

mit Ψ als Eigenzuständen des Systems. Sie sind in Wahrheit Produktwellenfunktionen, zusammengesetzt aus den intrinsischen Kernwellenfunktionen $\phi^{A\beta}_{n\beta}(\xi_\beta)$, den Elektronenwellenfunktionen $\phi^{e}_{n_1 n_2}(\vec{r},\vec{R})$ und den Relativwellenfunktionen $\phi^{A_1 A_2}_{n_1 n_2}(\vec{R})$. Letztere beschreiben die relative Bewegung der Kerne zueinander. Somit läßt sich Ψ schreiben als:

1.3.5 $$\Psi = \sum_{n_1 n_2} \phi^{A_1}_{n_1}(\vec{\xi}_1) \cdot \phi^{A_2}_{n_2}(\vec{\xi}_2) \cdot \phi^{A_1 A_2}_{n_1 n_2}(\vec{R}) \cdot \phi^{e}_{n_1 n_2}(\vec{r},\vec{R})$$

Dabei stehen die Laufzahlen n_β ,β =1,2 stellvertretend für alle Quantenzahlen, die zur vollständigen Beschreibung des Systems notwendig sind.

Die internen Kernwellenfunktionen $\phi^{A\beta}_{\beta}(\vec{\xi}_\beta)$ seien bereits vordiagonalisiert gemäß:

1.3.6 $$H_\beta(\vec{\xi}_\beta)\, \phi^{A\beta}_{n\beta}(\vec{\xi}_\beta) = E_{n\beta}\, \phi^{A\beta}_{n\beta}(\vec{\xi}_\beta) \quad , \beta = 1,2$$

Die $\varepsilon_{n\beta}$ sind die zu $H_\beta(\vec{\xi}_\beta)$ gehörigen Eigenwerte.

Wir suchen nun eine Gleichung, der die Wellenfunktionen $\phi^{A_1 A_2}_{n_1 n_2}$ und $\phi^{e}_{n_1 n_2}$ derart genügen, daß sie den Hamilton Operator H diagonalisieren. Dazu projezieren wir beide Wellenfunktionen aus der Schrödinger Gleichung heraus und erhalten dann in der Dirac´schen Schreibweise:

1.3.7 $$\langle \phi^{A_1}_{n_1} \cdot \phi^{A_2}_{n_2} | H - E | \Psi \rangle = 0$$

Sei nun

1.3.8 $$\chi_{n_1 n_2} = \Psi - \phi^{A_1}_{n_1} \cdot \phi^{A_2}_{n_2} \cdot \phi^{A_1 A_2}_{n_1 n_2} \cdot \phi^{e}_{n_1 n_2}$$

Mit Hilfe dieser Differenzwellenfunktion erhält 1.3.7 die Form:

1.3.9 $$\langle \phi^{A_1}_{n_1} \phi^{A_2}_{n_2} | H - E | \phi^{A_1}_{n_1} \phi^{A_2}_{n_2} \phi^{A_1 A_2}_{n_1 n_2} \phi^{e}_{n_1 n_2} \rangle = - \langle \phi^{A_1}_{n_1} \phi^{A_2}_{n_2} | H - E | \chi \rangle$$

Dabei ist

1.3.10 $$H = H_\beta + T_{A_1 A_2} + V^{A_1 A_2}_{N_1 N_2} + H_e + V^{e A_\beta}_{n\beta} \quad , \quad \beta = 1, 2$$

Wir erhalten damit für 1.3.9 (ß = 1,2):

1.3.11 $$(\varepsilon_{n\beta} + T_{A_1 A_2} + V^{A_1 A_2}_{N_1 N_2} + H_e + V^{e A_\beta}_{n\beta} - E) | \phi^{A_1 A_2}_{n_1 n_2} \phi^{e}_{n_1 n_2} \rangle =$$

$$-(\varepsilon_{n\beta} + T_{A_1 A_2} + H_e - E) \langle \phi^{A_1}_{n_1} \phi^{A_2}_{n_2} | \chi_{n_1 n_2} \rangle - \langle \phi^{A_1}_{n_1} \phi^{A_2}_{n_2} | V^{A_1 A_2}_{N_1 N_2} | \chi_{n_1 n_2} \rangle - \langle \phi^{A_1}_{n_1} \phi^{A_2}_{n_2} | V^{e A_\beta}_{n\beta} | \chi_{n}$$

$V^{A_1 A_2}_{N_1 N_2}$ ist das Kern-Kern Potential , gemittelt über die Kernladungsverteilung. Es ist identisch mit dem reinen Coulomb Potential für Abstände außerhalb der Reichweite der Kernkräfte. Für kleinere Abstände ist hingegen eine Modifikation dieses Potentiales nötig.

Die Wechselwirkung der Elektronen mit den einzelnen Nukleonen wird durch die Potentiale $V^{eA\beta}_{n\beta}$ beschrieben. Sie ist ebenfalls wieder über die Kernladungsverteilung gemittelt. Die rechte Seite von 1.3.11 enthält Skalarprodukte mit den Differenzwellenfunktionen $\chi_{n_1 n_2}$. Die explizit auftretenden drei Zusatzterme haben folgende physikalische Bedeutung.

Beim ersten Term wird die Elektronen-Kernbewegung gekoppelt mit angeregten Kernzuständen. Er liefert nur Beiträge für Abstände innerhalb deren Kernkräfte wirksam werden. In unserem Modell ist er daher zu vernachlässigen. Das zweite Glied liefert über die Kern 1 - Kern 2 Kopplung Beiträge zur Coulomb Anregung. Überlappen beide Kerne, so repräsentiert dieser Ausdruck die Wechselwirkung zwischen verschiedenen angeregten Kernzuständen. Das letzte Matrixelement schließlich beschreibt über $V^{eA\beta}_{n\beta}$ Kern-Elektron Kopplungen (gegenseitige Polarisation zwischen Elektronen und Kernen), die durch angeregte Kernzustände hervorgerufen werden.

Betrachten wir zunächst die Produktwellenfunktionen . Da im SI-Stoß die Kernladungszahlen beider Streupartner ungefähr gleich sind und mit der Ausbildung von molekularen Orbitalen zu rechnen ist, wählen wir für die Produktwellenfunktionen eine molekulare Basis.

Zunächst separieren wir den Radial- und den Winkelanteil der Wellenfunktion $\phi^{A_1 A_2}_{n_1 n_2} \equiv \phi^{N}_{n_1 n_2}$, die die Relativbewegung der Kerne beschreiben und koppeln diese mit den elektronischen Wellenfunktionen $\phi^{e}_{n_1 n_2}$ zu Wellenfunktionen $\phi(\vec{r},\vec{R})$ mit Gesamtdrehimpuls $\vec{I}$ und Projektionsquantenzahl M.

1.3.12 $$\phi(\vec{r},\vec{R}) = \sum_{\lambda L j} (L j I | m\, M\text{-}m)\, \phi^{N}_{\lambda L m}(\vec{R})\, i^{L}\, Y_{Lm}(\theta,\varphi)\, \phi^{e}_{\lambda j \mu}$$

$\vec{L}$ und $\vec{j}$ sind die Drehimpulse des Kernes bzw. der Elektronen.

m, μ sind die korrespondierenden Projektionen gemäß der Konvention $M = m + \mu$.

Die elektronische Wellenfunktion $\phi^{e}_{\lambda j \mu}$ ist ein vierkomponentiger Spinor. Der Index λ steht stellvertretend für alle Quantenzahlen, die außer L, m, j und μ das System beschreiben.

Als Quantisierungsachse wählen wir die Verbindungslinie der beiden Kerne. Durch die Stoßdynamik wird diese Achse jedoch ihre Lage im Raum verändern. Dies wird beschrieben mit Hilfe der Variablen $\theta(t)$ und φ der Rotationsmatrix $D^{j}_{\mu\mu'}$. Sie transformiert die molekularen Elektronenwellenfunktionen ins ruhende System:

1.3.13 $$\phi^{e}_{\lambda(j)\mu}(\vec{r},\vec{R}) = \sum_{\mu'} \mathcal{D}^{j}_{\mu\mu'}(\varphi,\theta(t),0)\, \tilde{\phi}^{e}_{\lambda(j)\mu}(1,2,\vec{R})$$

Die Kennzeichnung 1 (2) steht für die asymptotische Elektronenwellenfunktion für Kern 1 bzw. Kern 2. Der in Klammern gesetzte Elektronendrehimpuls j soll andeuten, daß er nur in der Asymptotik eine gute Quantenzahl ist, während des Stoßes aber nicht erhalten bleibt.

Somit haben wir für 1.3.12

1.3.14a $$\phi(\vec{r},\vec{R}) = \sum_{\lambda L j m \mu'} i^{L} (L\, j\, I \,|\, m\; M-m)\, \phi^{N}_{\lambda L}(\vec{R})\, Y^{m}_{L}(\theta(t),\varphi)\, \mathcal{D}^{j}_{\mu\mu'}(\varphi,\theta(t),\rho)\, \tilde{\phi}^{e}_{\lambda(j)\mu}(\vec{r},\vec{R})$$

mit Hilfe von

$$Y_{Lm}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{2L+1}{4\pi}}\; \mathcal{D}^{L}_{M0}(\varphi,\theta,0)$$

$$\sum_{m} (L\, j\, I \,|\, m\; M-m\rangle\, \mathcal{D}^{L}_{M0}(\varphi,\theta,0)\, \mathcal{D}^{j}_{M-m\,\mu}(\varphi,\theta,0) = (L\, j\, I \,|\, 0\, \mu')\, \mathcal{D}^{I}_{M\mu'}(\varphi,\theta,0)$$

läßt sich 1.3.14a umschreiben in

1.3.14b $$\phi(\vec{r},\vec{R}) = \sum_{\lambda L j \mu'} i^L \sqrt{\frac{2L+1}{4\pi}} (L\,j\,I\,|\,0\,\mu') \phi^N_{\lambda}(\vec{R}) \mathcal{D}^I_{M\mu'}(\varphi,\theta,0) \tilde{\phi}^e_{\lambda(j)\mu'}(\vec{r},\vec{R})$$

Für eine ausführliche Diskussion sei auf Ref 10 verwiesen.

Da im Hinblick auf die Ionsiation der Elektronenschalen lediglich die Elektronenwellenfunktion interessiert, müssen wir nach einer Möglichkeit suchen, die Kernwellenfunktionen aus der zeitabhängigen Schrödinger Gleichung

1.3.15 $$\left(H(t) - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) | \phi^e \phi^N \rangle = 0$$

zu separieren (Ref 10,34).

Der Hamilton Operator H(t) besteht aus einem Kern- und einem Elektronenanteil:

1.3.16 $$H(t) = \hat{H}_N(\vec{R}) + \hat{H}_D(\vec{r},\vec{R})$$

Der Kernanteil $\hat{H}_N(\vec{R})$ ist gegeben durch:

1.3.17 $$\hat{H}_N(\vec{R}) = \frac{\hat{p}_R^2}{2\mu} + \frac{\hat{L}^2(\vec{R})}{2\mu R^2} + V(\vec{R})$$

(μ = reduzierte Masse der Kerne, $\hat{L}$ = Drehimpulsoperator der Kerne)

$\hat{H}_N(\vec{R})$ läßt sich nun ersetzen durch die klassische Hamiltonfunktion , wenn wir die quantenmechanische Kernbahn ersetzen können durch die klassische Rutherford Hyperbel.

Mit der dimensionslosen Sommerfeldzahl

1.3.18 $$\eta = \frac{Z_1 \cdot Z_2 \cdot e^2}{\hbar v}$$

ist jedoch eine klassische Bahn für die Kerne gerechtfertigt wenn gilt:

1.3.19 $\eta \gg 1$

Dies ist jedoch (siehe Abschnitt 1.2 Annahmen) für unsere Streusysteme bei den gegebenen Stoßgeschwindigkeiten immer sehr gut erfüllt.

Damit können wir schreiben:

1.3.20 $$\hat{H}_N \Longrightarrow H_N = \frac{p_R^2}{2\mu} + \frac{L^2(\vec{R})}{2\mu R^2} + V(\vec{R})$$

Da der Elektronendrehimpuls $\vec{j}$ zusammen mit dem Kerndrehimpuls $\vec{L}$ den Gesamtdrehimpuls $\vec{I}$ ergibt, schreiben wir:

1.3.21 $$\hat{L} = \hat{I} - \hat{j}$$

Somit lautet der gesamte Hamilton Operator:

1.3.22 $$\begin{aligned} H(t) &= \frac{\hat{p}_R^2}{2\mu} + \frac{\hat{I}^2}{2\mu R^2} - \frac{\hat{I}\cdot\hat{j}}{\mu R^2} + \frac{\hat{j}^2}{2\mu R^2} + \hat{H}_D(\vec{r},\vec{R}) \\ &= \hat{H}_N + \frac{\hat{j}^2}{2\mu R^2} - \frac{\hat{I}\cdot\hat{j}}{\mu R^2} + \hat{H}_D(\vec{r},\vec{R}) \end{aligned}$$

Wird wegen 1.3.19 der Hamilton Operator H ersetzt durch die klassische Hamiltonfunktion H_N, so lassen sich aus 1.3.15 die Kernwellenfunktionen separieren, und wir erhalten eine Differentialgleichung, in der nur die Wellenfunktionen der Elektronen auftreten:

1.3.23 $$\left[H_D(\vec{r}_i, \vec{R}(t)) - i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right]\Psi^e(\vec{r}_i, \vec{R}(t)) = 0$$

Wegen der Eindeutigkeit von Ψ_e wollen wir im weiteren setzen $\Psi \equiv \Psi^e$. Der internukleare Abstand geht bemerkenswerter Weise nicht als dynamische Variable in die obige Schrödinger Gleichung ein, sondern tritt nur in Form des zeitabhängigen Parameters $\vec{R}(t)$ auf. Die Elektronenwellenfunktionen in

1.3.23 sind vollkommen antisymmetrische Wellenfunktionen (Slaterdeterminanten). Der Hamilton Operator H_D, der auch die Elektron-Elektron Wechselwirkung berücksichtigt, hat die Form:

$$1.3.24 \quad H(\vec{r}_i, \vec{R}) = \sum_i (\vec{\alpha}\cdot\vec{p} + \beta_i m) + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} - \sum_{i,N} \frac{Z_N e^2}{|\vec{r}_i - \vec{\varrho}_N|}$$

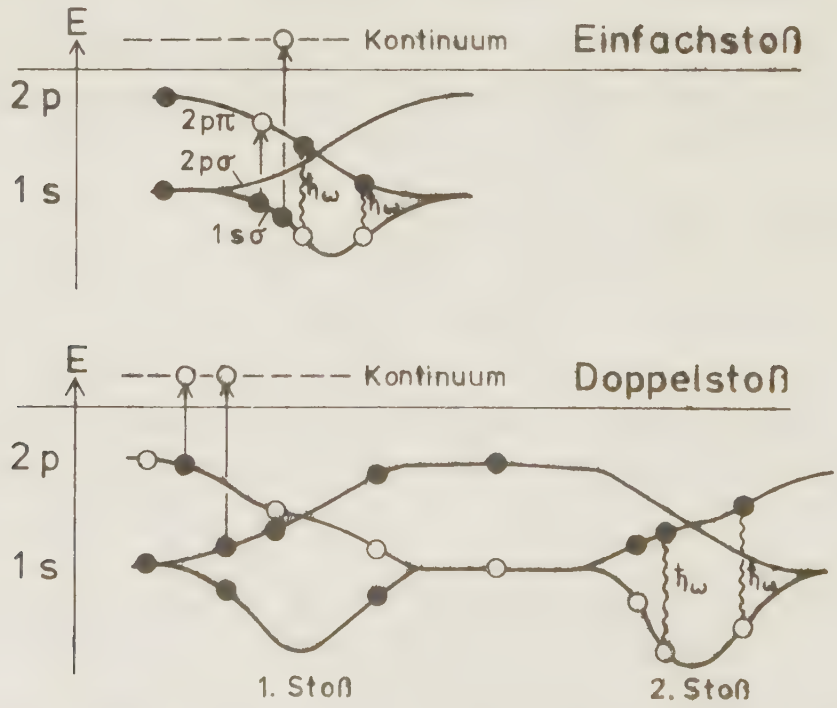
($\vec{r}_i$ sind die Elektronenkoordinaten und ϱ_1, ϱ_2 sind die Kernkoordinaten entsprechend den Ladungen Z1*e und Z2*e. Der Operator in 1.3.24 enthält, da nur die statische Coulomb Wechselwirkung berücksichtigt wird, weder Retardierungseffekte noch magnetische Energien. Die Beschreibung magnetischer Effekte erfordert einen Zusatzterm:

$$1.3.25 \quad H_{magn} = H_\varrho + H_\varphi = -Ze^2\left(V_\varrho \alpha_\varrho + V_\varphi \alpha_\varphi \left[|\vec{r} - \tfrac{\vec{R}}{2}|^{-1} - |\vec{r} + \tfrac{\vec{R}}{2}|^{-1}\right]\right)$$

Zur Beschreibung dieser Effekte siehe Ref 25. Bei der Berechnung der Ionisation der inneren Schalen wollen wir in erster Näherung die Elektron-Elektron-Wechselwirkung vernachlässigen.

1.4 Einfachstoß- und Doppelstoß Mechanismen

Damit es in der Nähe des Abstandes größter Kernannäherung zur Aussendung von MO-Strahlung kommen kann, muß vorher dafür gesorgt werden, daß die inneren Elektronenschalen völlig oder zumindest teilweise entvölkert sind. Im Prinzip gibt es hierfür zwei Mechanismen. Beim Einfachstoß findet die Ionisation der unteren Schalen im einlaufenden Kanal des ersten Stoßes statt, und beim Doppelstoß wird zunächst in der ersten Kollision ein Loch in einer etwas höheren Schale erzeugt, welches dann auf Grund der Stoßdynamik und der Zeitabhängigkeit der Bindungsenergie beim zweiten Stoß von der unteren Schale des atomaren Systems in die unterste Schale des molekularen Systems transferiert werden kann (Ref 32). Siehe auch Abbildung im Text.



Die Produktion von Löchern der höher liegenden L-Schale ist wesentlich wahrscheinlicher als die Ionisation der K-Schale. Man nahm daher lange Zeit an, daß für die K-Loch Erzeugung der Doppelstoßprozess der maßgeblichere sei. Entsprechend dem Fano-Lichten Promotionsmodell (Ref 33) wird im

einlaufenden Kanal der ersten Kollision ein 2p σ Elektron ins Kontinuum emittiert. Im auslaufenden Kanal "rutscht" das so entstandene Loch in die sich zurückbildende K-Schale des einen Stoßpartners. Beim zweiten Stoß geht es dann mit einer Wahrscheinlichkeit von 50 Prozent in den 1s σ Zustand des molekularen Systems über. Diese hohe Wahrscheinlichkeitsrate gilt nur für symmetrische Systeme, da in diesen Fällen die Energieniveaus entartet sind. Bei asymmetrischen Stößen ist diese Entartung jedoch aufgehoben, und die Wahrscheinlickeit des "Rutschens" des Elektrons von der atomaren K-Schale in die molekulare wird wesentlich geringer.

Im Experiment lassen sich Doppel- und Einfachstoßprozess dadurch unterscheiden und deuten, in dem der erstgenannte Mechanismus nur in einem hinreichend dicken Target vor sich gehen kann.

Die große Bindungsenergie des 1s σ Zustandes und die Tatsache, daß in der zeitabhängigen Störungstheorie in der Quantenmechanik die Übergangswarscheinlichkeit zwischen Niveaus mit den Energieeigenwerten E i und E f mit einem Faktor 1/(E f - E i)**2 behaftet ist, ließen die K-Loch Erzeugung vermittelst eines Einstoßprozess relativ unwahrscheinlich erscheinen. Die gekoppelten Kanalrechnungen haben jedoch sehr eindeutig gezeigt, daß zumindest bei schweren Systemen (U-U, Pb-Pb, U-Pb etc) der Einstoßmechanismus eine nicht unerhebliche Rolle spielt und Übergangswahrscheinlichkeiten von etlichen Prozenten bringt. Im Kapitel 7 "Ergebnisse und Diskussion" werden auch Rechnungen zum Doppelstoßprozess vorgestellt und besprochen.

2. STÖRUNGSRECHNUNG

2.1 Anregungen in höhere gebundene Zustände

Erste Berechnungen zur Ionisation der inneren Schalen wurden von Betz et al (Ref 13) angestellt. Als Lösungsmethode wurden nicht die gekoppelten Kanalgleichungen genommen, sondern auf die zeitabhängige Störungstheorie erster Ordnung zurückgegriffen. Der Unterraum des Hilbertraumes wurde auf zwei Zustände, $1s\sigma$ und $2s\sigma$, bzw $1s\sigma$ und $3s\sigma$ etc beschränkt. Kopplungen zu anderen Kanälen wurden nicht berücksichtigt. Außerdem wurden ebenfalls in Störungstheorie erster Ordnung Übergänge vom gebundenen 1s Zustand ins Kontinuum untersucht, ausgehend von:

$$2.1.1 \quad \dot{a}_n(t) = -\sum_{m\neq n} a_m(t) \langle \varphi_n(t) | \frac{\partial}{\partial t} | \varphi_m(t) \rangle \exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt' \left(E_n(t') - E_m(t')\right)\right)$$

Bei nur zwei Zuständen und einem anwesenden Elektron ergaben sich somit die Konfigurationen:

Da die anfänglichen Besetzungswahrscheinlichkeiten des $2s\sigma$, $3s\sigma$ etc Niveaus nicht bekannt waren, wurde zunächst

$$a_m(t) = \text{konstant}$$

gesetzt. damit brechen die gekoppelten Kanalgleichungen zusammen zu:

$$2.1.2 \quad \dot{a}_{ns\sigma}(t) = -\langle \varphi_{ns\sigma}(t) | \frac{\partial}{\partial t} | \varphi_{1s\sigma}(t) \rangle \exp\left[+\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt' \left[E_{ns\sigma}(t') - E_{1s\sigma}(t')\right]\right]$$

$$n = 2 \vee 3$$

Diese Differentialgleichung hat die Lösung:

2.1.3 $$a_{n s\sigma}(t) = -\int_{-\infty}^{t} dt \, \langle \varphi_{n s\sigma}(t) | \frac{\partial}{\partial t} | \varphi_{1 s\sigma}(t) \rangle \exp\left[+\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt' \left(E_{n s\sigma}(t') - E_{1 s\sigma}(t')\right)\right]$$

Die entsprechende Ionisationswahrscheinlichkeit der K-Schale ist dann gegeben durch:

2.1.4 $$P_K^{[0]}(t) = 1 - |a_{n s\sigma}(t)|^2 \quad , \quad n = 2 \vee 3$$

Man kann dann mit dem errechneten $a_{n s\sigma}(t)$ wieder hineingehen in

2.1.5 $$a_{1 s\sigma}(t) = -\int_{-\infty}^{t} dt \, a_{n s\sigma}(t) \langle \varphi_{n s\sigma} | \frac{\partial}{\partial t} | \varphi_{1 s\sigma} \rangle \exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt' \left(E_{n s\sigma} - E_{1 s\sigma}\right)\right)$$

und die Wahrscheinlichkeitsamplitude für den $1s\sigma$ Zustand näherungsweise berechnen. Damit können wir dann unseren Wert für $a_{n s\sigma}(t)$ korrigieren gemäß:

2.1.6 $$a_{n s\sigma}^{[I]}(t) = -\int_{-\infty}^{t} dt \, a_{1 s\sigma}(t) \langle \varphi_{n s\sigma} | \frac{\partial}{\partial t} | \varphi_{1 s\sigma} \rangle \exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt' \left(E_{n s\sigma} - E_{1 s\sigma}\right)\right)$$

bzw. für die K-Loch Wahrscheinlichkeit:

2.1.7 $$P_K^{[I]}(t) = 1 - |a_{n s\sigma}^{I}(t)|^2 \quad , \quad n = 2 \vee 3$$

Fig 2 zeigt uns die Lösung der K-Lochionisation in der Störungsrechnung. Die Struktur ist zum Teil auch typisch für die gekoppelten Kanalrechnungen. Wir haben im einlaufenden Kanal einen schwachen Anstieg, der bei etwa 300 - 400 fm beginnt und kurz vor Erreichen des Abstandes größter Kernannäherung (entsprechend 15 fm bei E lab = 1600 MeV im U-U Stoß) ein Maximum in der Ionisationswahrscheinlichkeit erreicht. Dieses liegt bei rund 5 Prozent. Die Kurve fällt dann wieder leicht ab und erreicht im Umkehrpunkt ein Minimum, welches nur unwesentlich unter dem ersten Maximum liegt. Im auslaufenden Kanal folgt dann ein sehr starker und

steiler Anstieg, der bei ungefähr 100 fm seinen größten Wert (rund 30 Prozent) erreicht und dann wieder abfällt. Es folgen dann noch zwei gedämpfte Oszillationen. Dann erreicht die Wahrscheinlichkeit bei etwa 2500 fm ihren asymptotischen Wert, der zirka der Hälfte des Maximums im auslaufenden Kanal entspricht. Diesen Effekt können wir folgendermaßen verstehen. Während der Kernannäherung fließt ein großer Teil der Elektronendichtewolke radial nach innen und folgt somit der Bewegung der Kerne. Im Umkehrpunkt erhält das System einen Schlag: die Bewegung kehrt sich um. Das 1s Elektron kann diesem Wechsel nicht sofort folgen, bleibt dementsprechend zurück, und verteilt sich mit seiner Aufenthaltsdichtewolke auf andere Zustände. Dieses Verhalten ist typisch für Systeme mit $(Z_1 + Z_2)^* \alpha > 1$.

2.2 Anregungen ins Kontinuum

Der Laufindex in den gekoppelten Kanalgleichungen schließt im Prinzip auch Kontinuumszustände mit ein. Anregungen ins positive Kontinuum wurden zuerst von Betz et al (Ref 13) in 1. Ordnung Störungstheorie gelöst. Die Kontinuumsmatrixelemente wurden von G. Soff (Ref 20) in der Monopolnäherung, d. h. für einen Kern mit der Ladung $Z = Z_1 + Z_2$ berechnet. Die Ergebnisse stimmen bis auf 2 Prozent mit den exakten Rechnungen überein, vorausgesetzt, man beschränkt sich auf den ohnehin für Übergänge maßgeblichen Kernabstandsbereich 20 fm < R < 400 fm. Bedingt durch die Normierung der Matrixelemente auf δ - Funktionen, müssen die Amplituden noch über das Energieband im Kontinuum integriert werden. Die gesamte Übergangsstärke ins Kontinuum ist gegeben durch:

2.2.1 $$D^2_{cont} = \int_{m_e}^{\infty} dE \, \left| \langle E_{s\sigma} | \frac{\partial}{\partial R} | 1s\sigma \rangle_{trans} \right|^2$$

Für die gebundenen Zustände gilt:

2.2.2 $$D^2_{n s\sigma} \cdot n^4 \approx \text{Konstant}$$

Die Skalierung der Übergangsstärke mit der vierten Potenz der Schalenhauptquantenzahl gewährleistet die Konvergenz der Summe in den gekoppelten Gleichungen. $a_m(t)$ wurde wiederum als konstant = 1 angenommen. Die Unitarität ist bei den Berechnungen leicht verletzt. Ihre Größenordnung ist :

$$P_{cont} = \int dE \, |a_E|^2$$

, was der totalen Anregung ins Kontinuum entspricht. Für den 1sσ Zustand beträgt P cont rund 5 Prozent.

Die Lösung der Differentialgleichung ist jedoch keine "Never come back" Näherung, da sie in ihrer Struktur Oszillationen aufweist. Dies deutet daraufhin, daß das K-Loch vom Kontinuum mit dem gebundenen 1sσ Zustand geteilt wird. Das 1s Elektron springt quasi laufend zwischen 1sσ Zustand und Kontinuum hin und her, bis es schließlich bei $t=\infty$ (ungefähr 1500 fm) seinen asmptotischen Wert (zirka 2.5 Prozent) erreicht. Die Oszillationen sind gegenüber denen der Amplituden für die gebundenen Zustände weitaus stärker gedämpft und zum Umkehrpunkt hin verschoben. Das Maximum der Wahrscheinlickeit befindet sich zwischen 40 und 50 fm und beträgt zirka 5 Prozent.

2.3 Vergleich: Störungsrechnung/gekoppelte Kanäle

Die Rechnungen der gekoppelten Kanäle zeigen bei der gleichen Anzahl von Basiszuständen und einem Elektron bis auf wenige Prozent sehr gute Übereinstimmung mit der Störungstheorie. Dies gilt sowohl für die Übergänge ins Kontinuum als auch für Übergänge von gebundenen Zuständen zu gebundenen Zuständen. Bei Berücksichtigung höherer Zustände und mehr Elektronen werden die Grenzen der Störungstheorie erwartungsgemäß immer deutlicher. Dies liegt daran, daß bei wachsender Zahl der Basiszustände und bei Anwesenheit mehrerer Elektronen verschiedene Konfigurationen ins Spiel kommen, und die Wechselwirkung bzw Kopplung zwischen den einzelnen Zuständen nicht mehr zu vernachlässigen ist. Hinzu kommt die Möglichkeit von zeitlichen Stufenprozessen, die selbst bei Beschränkung auf Ein-Elektronen Übergänge, z. B. $1s\sigma \longrightarrow 2s\sigma \longrightarrow 3s\sigma$ nicht unwesentliche Beiträge liefern.

3. DIE GEKOPPELTEN KANALGLEICHUNGEN

In Anbetracht der langsamen Kernbewegung ($v \approx 0.1 * c$) ist es naheliegend, bei der Lösung von

3.1 $$\left(H_D - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \Psi(\vec{r}_i, \vec{R}(t)) = 0$$

die Eigenlösungen der stationären Ein-Elektronen-Zwei-Zentren-Dirac Gleichung

3.2 $$\left[\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m + V_{TC} - E_\alpha(\vec{R}) \right] | \varphi_n(\vec{R}) \rangle = 0$$

3.3 $$V_{TC}(\vec{R}, \vec{r}) = -\frac{Z_1 e^2}{|\vec{r} - \vec{R}/2|} - \frac{Z_2 e^2}{|\vec{r} + \vec{R}/2|} = \sum_{\ell=0}^{\infty} P_\ell(\cos\theta) V_\ell$$

als Basis zur Lösung der zeitabhängigen Dirac Gleichung zu nehmen (Ref 21). Es hat sich gezeigt, daß die elektronischen Eigenenergien bereits bis zu einer Genauigkeit von 5 Prozent durch ein sphärisches symmetrisches Monopolpotential

3.4
$$V_0 = \frac{-2(Z_1 + Z_2) e^2}{R} \qquad r \leq \frac{R}{2}$$

$$V_0 = -(Z_1 + Z_2) \frac{e^2}{R} \qquad r > \frac{R}{2}$$

bestimmt werden. Voraussetzung ist, daß der internukleare Abstand nicht zu groß ($R < 1000$ fm) und nur die inneren Schalen berücksichtigt werden (Ref 26).

Die Basiswellenfunktionen $\varphi_n(R)$ bilden einen vollständigen orthonormierten Satz von Funktionen mit einer parametrischen Zeitabhängigkeit über $R(t)$. Wir können daher die Wellenfunktionen der dynamischen Zwei-Zentren-Dirac Gleichung nach

ihnen entwickeln:

3.5 $$\Psi(\vec{r},t) = \sum_n a_n(t)\, \varrho_n(\vec{r}, \vec{R}(t)) \cdot \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt' E_n(t')\right)$$

Die zeitabhängige Störungstheorie liefert uns nach elementarer Rechnung (Ref 22, 10) einen Satz gekoppelter Differentialgleichungen für die Entwicklungskoeffizienten:

3.6 $$\dot{a}_n(t) = -\sum_{m\neq n} a_m(t) \langle \varrho_m | \frac{\partial}{\partial t} | \varrho_n \rangle \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt' (E_m - E_n)\right)$$

Wir können nun das Matrixelement $\langle \varrho_n | \frac{\partial \phi_m}{\partial t} \rangle$ auf einfache Weise umformen. Diffenzieren wir:

3.7 $$H_D \phi_m = E_m \phi_m$$

nach der Zeit und multiplizieren von links mit $\langle \phi_n |$, so erhalten wir unter Ausnutzung der Orhogonalität der Basisfunktionen:

3.8 $$\langle \phi_n \frac{\partial H_D}{\partial t} | \phi_m \rangle + \langle \phi_n | H_D | \frac{\partial \phi_m}{\partial t} \rangle = E_n \langle \phi_n | \frac{\partial \phi_m}{\partial t} \rangle$$

Hierbei ist n ungleich m.

Da gilt: $\langle \phi_n | H_D = E_n$ erhalten wir:

3.9 $$\langle \phi_n | \frac{\partial \phi_m}{\partial t} \rangle = -\frac{1}{E_n - E_m} \langle \phi_n | \frac{\partial H_D}{\partial t} | \phi_m \rangle$$

Für n = m ist das Matrixelement rein imaginär und kann durch passende Wahl der $| \phi_m \rangle$ zum Verschwinden gebracht werden (Ref 22). Da die Norm erhalten bleibt gilt:

3.10 $$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle \phi_m | \phi_m \rangle &= 0 \\ &= \langle \frac{\partial \phi_m}{\partial t} | \phi_m \rangle + \langle \phi_m | \frac{\partial \phi_m}{\partial t} \rangle \\ &= \langle \phi_m | \frac{\partial \phi_m}{\partial t} \rangle^* + \langle \phi_m | \frac{\partial \phi_m}{\partial t} \rangle \end{aligned}$$

Daraus läßt sich schließen:

3.11 $$\langle \phi_m | \frac{\partial \phi_m}{\partial t} \rangle = i\, g(t) \quad , \quad g(t) \in \mathbb{R}$$

Ändert sich die Phase von ϕ_m um $\omega(t)$, so ergibt sich eine neue Wellenfunktion gemäß:

3.12 $$\phi_m' = \phi_m \cdot e^{i\omega(t)}$$

Dies liefert:

$$\langle \phi_m' | \frac{\partial \phi_m'}{\partial t} \rangle = \langle \phi_m' | \frac{\partial \phi_m}{\partial t} e^{i\omega t} \rangle + \langle \phi_m' | i\dot{\omega}(t)\, \phi_m' \rangle$$

3.13 $$= \langle \phi_m' | \frac{\partial \phi_m}{\partial t} \rangle + i\dot{\omega}(t)$$

$$= i\, g(t) + i\,\dot{\omega}(t)$$

Setzen wir daher

3.14a $$\phi_m' = \phi_m \cdot \exp\left(-i \int_{-\infty}^{t} dt'\, g(t')\right)$$

so gilt:

3.14b $$\langle \phi_m | \frac{\partial \phi_m}{\partial t} \rangle = 0$$

Analog zu 3.6 ist demnach der folgende Satz gekoppelter Kanalgleichungen:

3.15 $$\dot{a}_n(t) = \sum_m a_m(t) \cdot \frac{\langle \phi_n | \frac{\partial H_0}{\partial t} | \phi_m \rangle}{E_n - E_m} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{t} dt' (E_n - E_m)}$$

Der Operator $\partial/\partial t$ in 3.6 wirkt auf die Basisfunktionen nur über ihre Bahnabhängigkeit R(t). Da wir die Stoßdynamik im System der rotierenden Kerne beschreiben wollen, zerfällt der $\partial/\partial t$ Operator in einen Radial- und einen Rotations--(=Coriolis-)anteil:

3.16 $$\frac{\partial}{\partial t} = \dot{R}\frac{\partial}{\partial R} + \dot{\theta}_{rot}\frac{\partial}{\partial \theta_{rot}} = v_R(t)\frac{\partial}{\partial R} - \frac{i}{\hbar}\vec{\omega}\cdot\vec{j}$$

mit der Bahngeschwindigkeit $v_R(t)$ und der Winkelgeschwindigkeit $\vec{\omega}$. Damit wird Gleichung 3.6 zu:

3.17 $$\dot{a}_n(t) = -\sum_{m\neq n} a_m(t)\langle \varphi_m | v_R\frac{\partial}{\partial R} - \frac{i}{\hbar}\vec{\omega}\cdot\vec{j} | \varphi_n\rangle \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt'(E_n - E_m)}$$

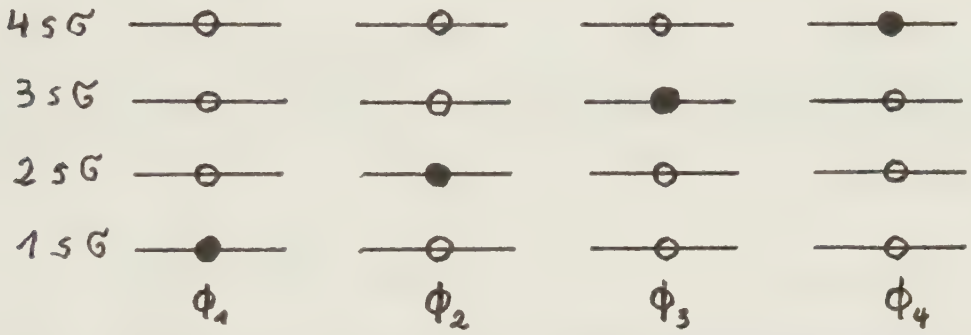
Die Matrixelemente $\langle \varphi_n | \frac{\partial}{\partial R} | \varphi_m\rangle$ und $\langle \varphi_n | \vec{j} | \varphi_m\rangle$ zeigen eine unterschiedliche R(t)-Abhängigkeit und gehorchen verschiedenen Auswahlregeln (siehe auch Kapitel 4 "Kopplungsmechanismen").

Die Summation in 3.6 läuft für die exakten Lösungen von m = 1 bis unendlich. Bei den Rechnungen muß man sich allerdings aus rechentechnischen Gründen auf einen endlichen Unterraum des Hilbert-Raumes beschränken. So wurden z. B. bei der Berechnung der K-Schalenionisation durch radiale Kopplung maximal 5 Zustände (1 s σ bis 5 s σ) berücksichtigt. Bei der Rotationskopplung waren es 6 Zustände (2 p 1/2 $\pm\sigma$, 2 p 3/2 $\pm\sigma$, 2 p 3/2 $\pm\pi$) und bei den Kontinuumsrechnungen sogar teilweise erheblich mehr. Das gefundene Konvergenzverhalten läßt diese Einschränkung gerechtfertigt erscheinen. Zudem dürften aus physikalischen Gründen (z. B. Abschirmungseffekte) höhere s-Zustände - wenn überhaupt - nur eine untergeordnete Rolle spielen.

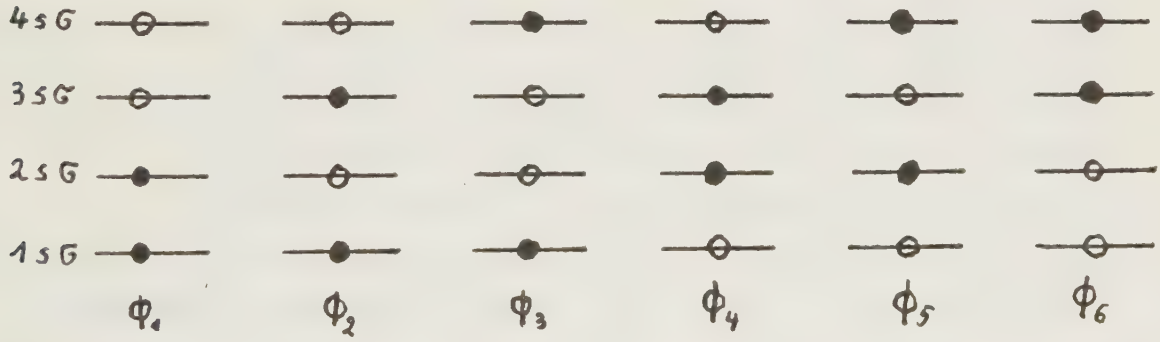
Ein weiteres Argument für die Beschränkung auf eine Fünferbasis im Falle der radialen Kopplung liefert das folgende Verhalten der Matrixelemente. In guter Näherung skalieren die radialen Matrixelemente zwischen den Zuständen n s σ und (n+k) s σ wie (k+1)**-2. Die starke Dämpfung der Übergangsraten macht zumindest für die Berechnung der K-Lochwahrscheinlichkeit die Berücksichtigung von Zuständen höher als 5 s σ überflüssig.

Der Laufindex in Gleichung 3.6 geht beim Ein-Elektronenproblem bzw. beim Ein-Lochproblem über die einzelenen Zustände. Beim Mehr-Elektronenproblem muß allerdings über Konfigurationen und nicht mehr über reine Zustände summiert werden.

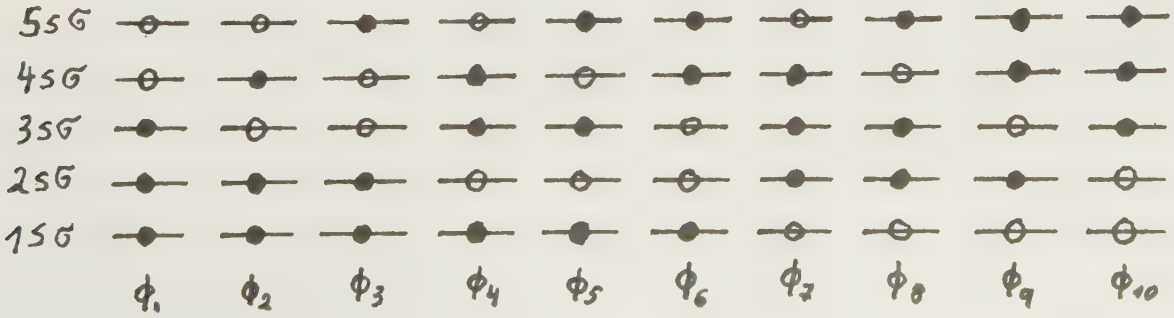
Bei der Berücksichtigung von vier gebundenen Zuständen gibt es z. B. bei einem Elektron vier Konfigurationen:



und bei der Anwesenheit von zwei Elektronen bereits sechs verschiedene Konfigurationen:



Bei einer Basis von fünf Zuständen ergeben sich bei drei Elektronen zehn Möglichkeiten:



Die K-Lochwahrscheinlichkeit wäre im ersten Fall gegeben durch die Summe der Einzelwahrscheinlichkeiten der Konfigurationen ϕ_2, ϕ_3, ϕ_4. Symbolisch schreiben wir:

3.18 $$P_K = |\phi_2|^2 + |\phi_3|^2 + |\phi_4|^2$$

Für das 2. Beispiel gilt dann entsprechend:

3.19 $$P_K = |\phi_4|^2 + |\phi_5|^2 + |\phi_6|^2$$

und analog für das dritte Beispiel:

3.20 $$P_K = |\phi_7|^2 + |\phi_8|^2 + |\phi_9|^2 + |\phi_{10}|^2$$

Die Anzahl der zu berücksichtigenden Kanäle, d. h. der Konfigurationen als Funktion von der Anzahl der Zustände und der Anzahl der anwesenden Elektronen folgt einer Binomialverteilung.

$$\begin{matrix}\text{Anzahl der} \\ \text{möglichen Kanäle}\end{matrix} = \begin{pmatrix}\text{Anzahl der Zustände} \\ \text{Anzahl der Elektronen}\end{pmatrix}$$

Verwendet man für die Konfigurationswellenfunktionen vollkommen antisymmetrische Produktzustände, so gehen bei einer solchen Slater Basis alle Übergangsmatrixelemente wieder über in Ein-Teilchen Matrixelemente, die dem Pauli-Prinzip unterliegen (siehe Anhang B). Die Slaterdeterminante für eine derartige Konfigurationswellenfunktion lautet z. B. für unseren radialen Basissatz:

3.21

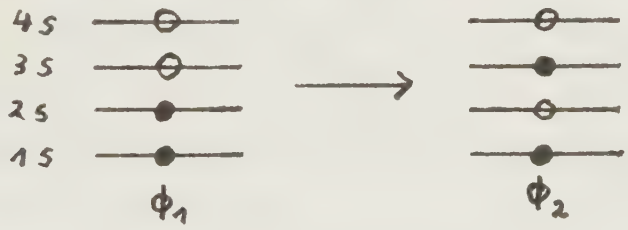
$$\phi_i = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{vmatrix} \varrho_{1s}(1) & \varrho_{1s}(2) & \varrho_{1s}(3) & \varrho_{1s}(4) & \varrho_{1s}(5) \\ \varrho_{2s}(1) & \varrho_{2s}(2) & \varrho_{2s}(3) & \varrho_{2s}(4) & \varrho_{2s}(5) \\ \varrho_{3s}(1) & \varrho_{3s}(2) & \varrho_{3s}(3) & \varrho_{3s}(4) & \varrho_{3s}(5) \\ \varrho_{4s}(1) & \varrho_{4s}(2) & \varrho_{4s}(3) & \varrho_{4s}(4) & \varrho_{4s}(5) \\ \varrho_{5s}(1) & \varrho_{5s}(2) & \varrho_{5s}(3) & \varrho_{5s}(4) & \varrho_{5s}(5) \end{vmatrix}$$

Die vollständige Wellenfunktion ist dann wiederum gegeben durch:

3.22 $$\Psi(\vec{r},t) = \sum_{i=1}^{5} a_i \, \phi_i$$

Zwei Beispiele mögen das eben Gesagte an Hand eines Zwei-Elektronenproblems erläutern.

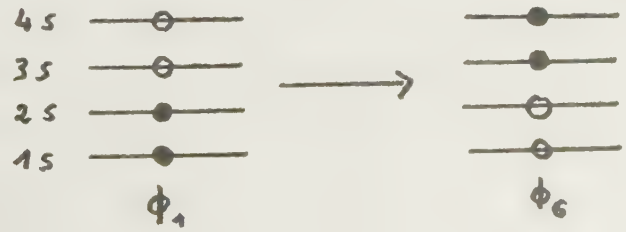
Ein Übergang von Konfiguration 1 nach 2, also



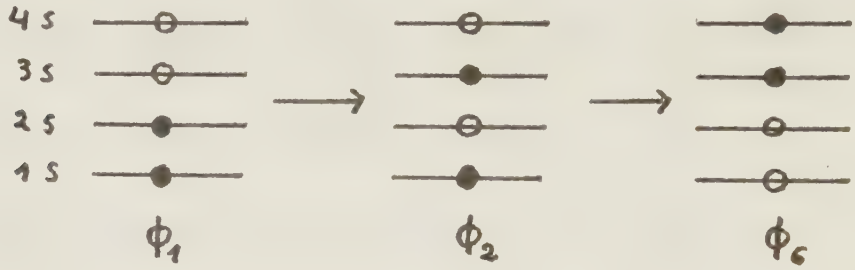
wird beschrieben durch

3.23 $$\langle \phi_2 | \frac{\partial}{\partial R} | \phi_1 \rangle \rightarrow \langle \phi_2 | \frac{\partial}{\partial R_1} + \frac{\partial}{\partial R_2} | \phi_1 \rangle = \langle \varrho_{3s\sigma} | \frac{\partial}{\partial R} | \varrho_{2s\sigma} \rangle$$

(siehe auch Anhang B). Da wir uns auf Übergänge beschränken wollen, bei denen nur ein Elektron zu einem gewissen Zeitpunkt springt, verschwindet z. B. beim Übergang



das Matrixelement $\langle \phi_6 | \frac{\partial}{\partial R} | \phi_1 \rangle$. Diese Einschränkung verbietet jedoch nicht den indirekten Übergang über einen Zwischenzustand, z. B.



Der Übersichtlichkeit wegen wollen wir im folgenden nur das Aufstellen der Kanalgleichungen für vier Zustände und zwei Elektronen beschreiben. Die möglichen Konfigurationen sind identisch mit denen auf Seite 33.

$$\langle \phi_2 | \partial/\partial R | \phi_1 \rangle = \langle \varrho_3 | \partial/\partial R | \varrho_2 \rangle \equiv \langle 32 \rangle$$
$$\langle \phi_3 | \partial/\partial R | \phi_1 \rangle = \langle \varrho_4 | \partial/\partial R | \varrho_2 \rangle \equiv \langle 42 \rangle$$
$$\langle \phi_4 | \partial/\partial R | \phi_1 \rangle = \langle \varrho_3 | \partial/\partial R | \varrho_1 \rangle \equiv \langle 31 \rangle$$
$$\langle \phi_5 | \partial/\partial R | \phi_1 \rangle = \langle \varrho_4 | \partial/\partial R | \varrho_1 \rangle \equiv \langle 41 \rangle$$
$$\langle \phi_6 | \partial/\partial R | \phi_1 \rangle = \quad -$$
$$\langle \phi_3 | \partial/\partial R | \phi_2 \rangle = \langle \varrho_4 | \partial/\partial R | \varrho_3 \rangle \equiv \langle 43 \rangle$$
$$\langle \phi_4 | \partial/\partial R | \phi_2 \rangle = \langle \varrho_2 | \partial/\partial R | \varrho_1 \rangle \equiv \langle 21 \rangle$$
$$\langle \phi_5 | \partial/\partial R | \phi_2 \rangle = \quad -$$
$$\langle \phi_6 | \partial/\partial R | \phi_2 \rangle = \langle \varrho_4 | \partial/\partial R | \varrho_1 \rangle \equiv \langle 41 \rangle$$
$$\langle \phi_4 | \partial/\partial R | \phi_3 \rangle = \quad -$$
$$\langle \phi_5 | \partial/\partial R | \phi_3 \rangle = \langle \varrho_2 | \partial/\partial R | \varrho_1 \rangle \equiv \langle 21 \rangle$$
$$\langle \phi_6 | \partial/\partial R | \phi_3 \rangle = \langle \varrho_3 | \partial/\partial R | \varrho_1 \rangle \equiv \langle 31 \rangle$$
$$\langle \phi_5 | \partial/\partial R | \phi_4 \rangle = \langle \varrho_4 | \partial/\partial R | \varrho_3 \rangle \equiv \langle 43 \rangle$$
$$\langle \phi_6 | \partial/\partial R | \phi_4 \rangle = \langle \varrho_4 | \partial/\partial R | \varrho_2 \rangle \equiv \langle 42 \rangle$$
$$\langle \phi_6 | \partial/\partial R | \phi_5 \rangle = \langle \varrho_3 | \partial/\partial R | \varrho_2 \rangle \equiv \langle 32 \rangle$$

Daraus ergibt sich der folgende Satz gekoppelter Differentialgleichungen:

$$3.24 \quad \begin{pmatrix} \dot{a}_1 \\ \dot{a}_2 \\ \dot{a}_3 \\ \dot{a}_4 \\ \dot{a}_5 \\ \dot{a}_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & +\langle 32\rangle\omega_{23} & +\langle 42\rangle\omega_{24} & +\langle 31\rangle\omega_{13} & +\langle 41\rangle\omega_{14} & 0 \\ -\langle 32\rangle\omega_{23}^* & 0 & +\langle 43\rangle\omega_{34} & +\langle 21\rangle\omega_{12} & 0 & +\langle 41\rangle\omega_{14} \\ -\langle 42\rangle\omega_{24}^* & -\langle 43\rangle\omega_{34}^* & 0 & 0 & +\langle 21\rangle\omega_{12} & +\langle 31\rangle\omega_{13} \\ -\langle 31\rangle\omega_{13}^* & -\langle 21\rangle\omega_{12}^* & 0 & 0 & +\langle 43\rangle\omega_{34} & +\langle 42\rangle\omega_{24} \\ -\langle 41\rangle\omega_{14}^* & 0 & -\langle 21\rangle\omega_{12}^* & -\langle 43\rangle\omega_{34}^* & 0 & +\langle 32\rangle\omega_{23} \\ 0 & -\langle 41\rangle\omega_{14}^* & -\langle 31\rangle\omega_{13}^* & -\langle 42\rangle\omega_{24}^* & -\langle 32\rangle\omega_{23}^* & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \\ a_5 \\ a_6 \end{pmatrix}$$

Für die auftretenden Phase wurde vereinfachend gesetzt

$$3.25 \quad \omega_{nm} = \exp\left[+\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t}\left(E_n(t') - E_m(t')\right)dt'\right]$$

Durch die Verwendung der Beziehung $\langle nm\rangle = -\langle mn\rangle^*$ läßt sich dieser Satz noch weiter vereinfachen.

Für die Übertragung in den Computer-Code wurden die Kanalgleichungen aufgespalten in ihren reellen und ihren imaginären Anteil. Es ergibt sich dann der doppelte Satz der ursprünglichen Differentialgleichungen. Jedes Matrixelement in Gleichung 3.24 zerfällt dann nach folgendem Schema in jeweils vier Matrixelemente:

$$3.26 \quad V_{nm} = \langle nm\rangle\,\omega_{nm} \longrightarrow \begin{matrix} Re(V_{nm}) & -Im(V_{nm}) \\ Im(V_{nm}) & Re(V_{nm}) \end{matrix}$$

wobei Re und Im für Realteil und Imaginärteil steht. Für die Berechnung der Ionisationswahrscheinlichkeiten wurden dann die Realteile und ihre entsprechenden Imaginärteile einzeln quadriert und anschließend addiert. Die Summe aller Amplitudenquadrate wurde auf Eins normiert.

Daher gilt die Beziehung:

$$3.27 \quad \sum_{m=1}^{6} |a_m|^2 = |a_1|^2 + |a_2|^2 + |a_3|^2 + |a_4|^2 + |a_5|^2 + |a_6|^2 = 1$$

Für die jeweiligen Schalenionisationen müssen die entsprechenden Kombinationen der obigen Konfigurationswahrscheinlichkeiten genommen werden.

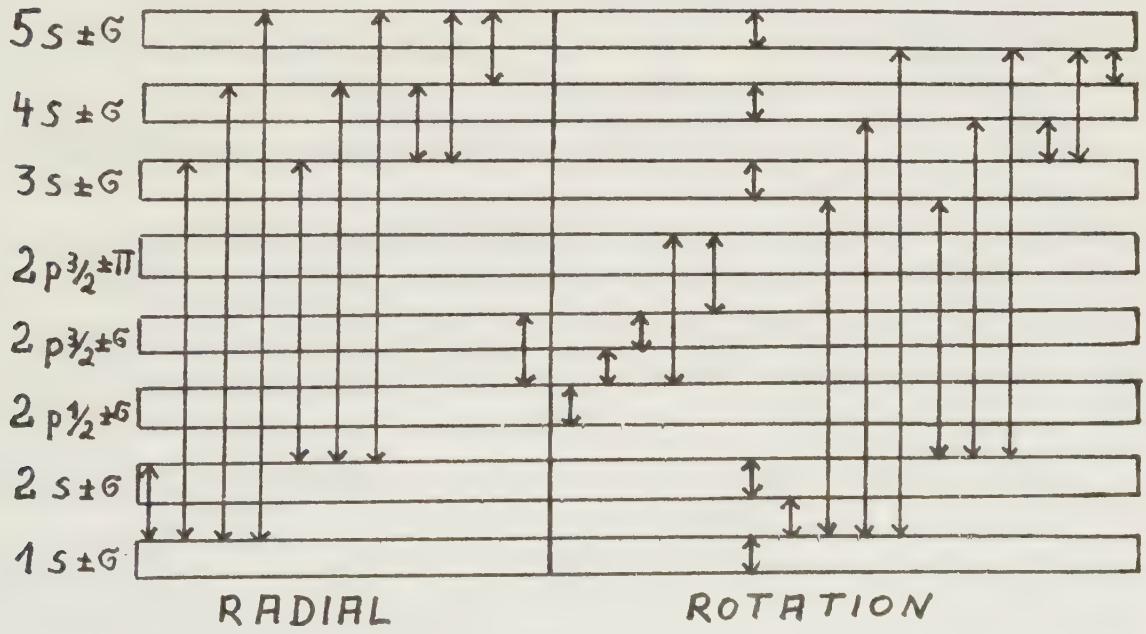
4. KOPPLUNGSMECHANISMEN

Im rotierenden Bezugssystem der beiden Kerne spaltet der $\partial/\partial t$ Operator auf in einen Radial- und einen Rotationsteil.

4.1 $$\frac{\partial}{\partial t} = \dot{R}\frac{\partial}{\partial R} - i\vec{\omega}_{rot}\cdot\hat{j}$$

Beide gehorchen verschiedenen Auswahlregeln.

Der $\partial/\partial R$ Operator läßt die Projektion $|m_j|$ = 1/2, 3/2, 5/2 ... der Quantenzahl j_z unverändert, währendem die Coriolis-kopplung sie um eins erhöht, bzw. erniedrigt. Die Eigenwerte $|m_j|$ = 1/2, 3/2, 5/2 bezeichnet man auch mit σ, π, δ. Aus der nachstehenden Abbildung ersehen wir für beide Kopplungen die möglichen bzw. erlaubten Übergänge für die s-Zustände und die unteren p-Zustände.



Beim U-U System ist bei Einschußenergien, die die Kerne auf weniger als 35 fm aneinander bringen, bei der Anwendung der Formel 4.1 Vorsicht geboten. Bei geringeren Abständen

nämlich, taucht das 1 s σ Niveau in das negative Kontinuum ein und entartet. Durch die Wechselwirkung mit dem gebundenen Zustand werden die Kontinuumszustände geknautscht und die Phase der größten Kernannäherung kann dann nicht mehr als adiabatisch angesehen werden (Ref 23).

Wegen $\omega_{rot} = \frac{b \cdot v}{R^2}$ verschwindet bei Zentralstößen die Rotationskopplung (b=0), und die radiale Kopplung bleibt als einzige Wechselwirkung erhalten.

Bei symmetrischen Stößen, wie wir es z. B. bei U-U bzw. Pb-Pb zu tun haben, ist die Parität der Wellenfunktionen eine Erhaltungsgröße. Der Satz gekoppelter Kanalgleichungen entkoppelt daher in je einen Satz Differentialgleichungen für gerade und ungerade Parität.

Der radiale Operator koppelt bei den Niveaus gerader Parität an alle n sσ, n dσ, n gσ etc. Zustände. Bei den vorliegenden Rechnungen wurden nur die Kopplungen unter den s-Zuständen berücksichtigt. Auffallend ist hier die Stärke der Matrixelemente in der Nähe der kleinsten Kernannäherung. (Ref 24). Dies gilt besonders für die Matrixelemente der Art $\langle nS\sigma | \frac{\partial}{\partial R} | 1S\sigma \rangle$. Zwischen benachbarten Zuständen ist die Stärke der Matrixelemente ungefähr gleich. In guter Näherung skalieren die übrigen Matrixelemente $\langle (n+k)S\sigma | \frac{\partial}{\partial R} | nS\sigma \rangle$ wie 1/(k+1)**2.

Für t $\rightarrow \infty$ sollte die Kopplung zwischen den gebundenen Zuständen verschwinden. Die Matrixelemente streben jedoch einem konstanten Wert zu. Folgende Überlegung verhilft uns zum richtigen Verhalten der Matrixelemente in der Asymptotik.

Bates et al (Ref 28) wies darauf hin, daß die molekularen Eigenfunktionen $\varphi_n(\vec{R})$ asymptotisch nicht die Lösungen der

Schrödinger-Gleichung darstellen. Er führte daher einen sogenannten "Translationsfaktor" $T = \exp(-i/2 * m_e * \vec{v} * \vec{r})$ ein. $\vec{v}$ ist hierbei die Projektilgeschwindigkeit. Mit den Funktionen $\varrho_n(R) * T$ konnte er das richtige Asymptotenverhalten simulieren.

Greenland (Ref 27) baute diesen Translationsfaktor in erster Ordnung in $\vec{v}$ in seine Rechnungen mit ein und erhielt folgendes korrigiertes Matrixelement:

$$4.2 \quad \langle \varrho_n | \frac{\partial}{\partial R} | \varrho_m \rangle_{trans} = \langle \varrho_m^{(+)} | \frac{\partial}{\partial R} | \varrho_m^{(+)} \rangle - \frac{m}{2} (E_m^{(+)} - E_n^{(-)}) \langle \varrho_n^{(-)} | z | \varrho_m^{(+)} \rangle$$

$\varrho_n^{(-)}$ ist dabei der molekulare Zustand negativer Parität (z. B. 2 p 1/2 σ), der asymptotisch in den atomaren Zustand positiver Parität $\varrho_n^{(+)}$ (z. B. 1 s σ) übergeht. Der Operator im letzten Matrixelement ist die intrinsische Koordinate längs der molekularen Achse. Die Matrixelemente $\langle \varrho_n | \partial/\partial R | \varrho_m \rangle$ gehen bei Abständen größer als 2000 fm sehr rasch gegen Null. Das entspricht in etwa dem Abstand, bei dem die beiden K-Schalen der Stoßpartner sich gegenseitig "spüren" und beeinflußen.

Bei der Berechnung der Wahrscheinlichkeitsamplituden wurden die Matrixelemente linear interpoliert. Grundlage der Interpolation waren von W. Betz (Ref 26) exakt berechnete Stützstellen mit logarithmischer Verteilung. Die Anzahl der Stützstellen und die Genauigkeit der Interpolation erwies sich als ausreichend.

Bedingt durch den steilen Anstieg der Matrixelemente in der Nähe des Umkehrpunktes ($R \approx R$ min) ist die exakte Struktur der Matrixelemente bei großen Kernabständen, insbesondere die Modifikation der Übergangselemente durch Translationsfaktoren nur von untergeordneter Bedeutung (Ref 13, 27, 28). Zur Dämpfung der unphysikalischen Oszillationen in der

Besetzungsamplitude bei sehr großen Abständen wurden die Matrixelemente ab 1300 fm mit einer Gauss´schen Verteilungskurve gemäß

$$\exp\left(-\left(\frac{R_1 - R_2}{R_2}\right)^2\right)$$

behaftet (R 1 = 1300 fm, R 2 = 777 fm). Wir erhalten somit für t = $+\infty$ eine konstante Konfigurationswahrscheinlichkeit. Für die Rotationskopplung wurden zum Abschneiden der Matrixelemente die Parameter R 1 = 3000 fm und R 2 = 1000 fm gewählt.

Der Coriolisoperator koppelt, ausgehend vom 1 s σ Niveau, zum 3 d π Zustand als nächst niedrigsten. Da wir aus Gründen der Adiabasie nur an den unteren molekularen Orbitalen interessiert sind, wurde diese Kopplung bei den Rechungen vernachläßigt. Dies wird um so mehr gerechtfertigt, als die entsprechenden Matrixelemente für kleine Abstände verschwinden.

Beim Satz der Kanalgleichungen ungerader Parität liegt die Betonung auf der Rotationskopplung. Im auslaufenden Kanal kommt jedoch bei zirka 500 fm nuklearem Abstand die radiale Kopplung zwischen 2 p 3/2 σ und 2 p 1/2 σ zum Tragen.

5. KONTINUUMSÜBERGAENGE

Wie bereits in Abschnitt 2.2 bemerkt, läuft der Summationsindex in

$$5.1 \quad \dot{a}_n(t) = -\sum_{m \neq n} a_m(t) \langle \varphi_n | \frac{\partial}{\partial t} | \varphi_m \rangle \exp\left[+\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{t} dt' (E_n(t') - E_m(t'))\right]$$

nicht nur über die gebundenen Zustände, sondern schließt auch die stetige Verteilung der Kontinuumszustände mit ein. Zur Berechnung der Elektronenemissionswahrscheinlichkeit wurde daher das Kontinuum diskretisiert. Berücksichtigt werden Übergänge vom 1 s, 2 s, 3 s und 4 s Zustand ins Kontinuum. Entsprechend dem gebundenen Zustand wurden verschieden viele Kontinuumszustände berücksichtigt, um ein Kontinuumsintervall von 1 bis 4 m_e c**2 abzudecken. Die Anzahl der Kanäle richtete sich nach der Stärke der Matrixelemente $\langle E_{c_m} | \partial/\partial R | n s \sigma \rangle$ Zur gleichmäßigen Abdeckung eines bestimmten Energiebandes sind bei 1 s Übergängen die wenigsten, bei 4 s Übergängen die meisten Kanäle zu berücksichtigen. Z. B. waren es bei einem Energieintervall von (1, 3) Elektronenmassen im ersten Fall 9 und im zweiten Fall 25 diskrete Kontinuumszustände.

Die relativistischen Kontinuumsmatrixelemente wurden mit Hilfe eines freundlicher Weise von G. Soff zur Verfügung gestellten Programmes in der Monopolnäherung berechnet, d.h. es wurde ein aufgeblasener Kern mit Radius 0.5*R zu Grunde gelegt. Im wahrscheinlichsten Bereich für Elektronenemission ins Kontinuum, d. h. im Intervall 20 fm bis 400 fm ergeben sich lediglich Abweichungen von etwa 2 Prozent gegenüber den exakten Rechungen. Die berechneten Punkte der Matrixelemente (zwischen 7 und 10 pro Kontinuumsenergie im Intervall 20 fm bis 400 fm) wurden auf Millimeterpapier übertragen und durch eine stetige Kurve verbunden. Sie wurden gemäß der Parame-

trisierung

5.2 $$\langle E_c | \frac{\partial}{\partial R} | n s \sigma \rangle \approx a \cdot R^b \quad , \quad (R \text{ in fm})$$

gefittet und in die Rechungen eingebaut.

Da die Kontinuumswellenfunktionen auf Delta-Funktionen normiert sind, ist die Einheit der Matrixelemente entsprechend $[\sqrt{m_e c^2} \cdot fm]^{-1}$. In Folge dessen ist die Gesamtanregungswahrscheinlichkeit ins Kontinuum gegeben durch:

5.3 $$|a_n|^2 = \int dE \, |a_E|^2$$

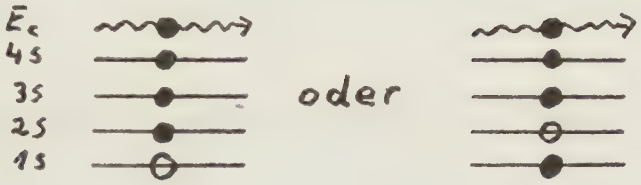
In erster Näherung wurde daher gesetzt:

5.4 $$a_m(t) = \int_{-\infty}^{t} dt \; a_n(t) \cdot \dot{R} \langle E_{c_n} | \frac{\partial}{\partial R} | n s \sigma \rangle \sqrt{\Gamma(E_{c_n})} \; e^{+\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{t} dt' (E_n - E_m)}$$

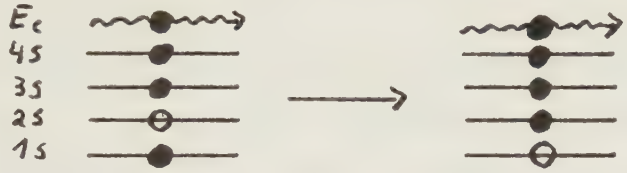
Bei hinreichend enger Staffelung der Kontinuumsenergien kann man die Breite $\Gamma(E_{c_n})$ als konstant ansehen und vor das Integral ziehen. In den Rechungen entsprach daher jeder diskreten Kontinuumsenergie eine verschiedene, im Einzelfall jedoch konstante Breite.

Durch die Diskretisierung des Kontinuums bleibt daher die Hermitizität des Systems erhalten. Die Lösung der Kanalrechnungen für das Kontinuum stellt somit auch keine "Never come back" Näherung dar. Sie oszilliert vielmehr mit einer Frequenz von rund 150 fm um einen konstanten Mittelwert. Bei der Mitnahme mehrerer gebundener Zustände wurden sowohl die Wechselwirkungen der gebundenen Zustände untereinander als auch die Kopplungen der gebundenen Zustände an das Kontinuum berücksichtigt. Somit ist bei einer Grundkonfiguration

nicht nur Übergängen wie



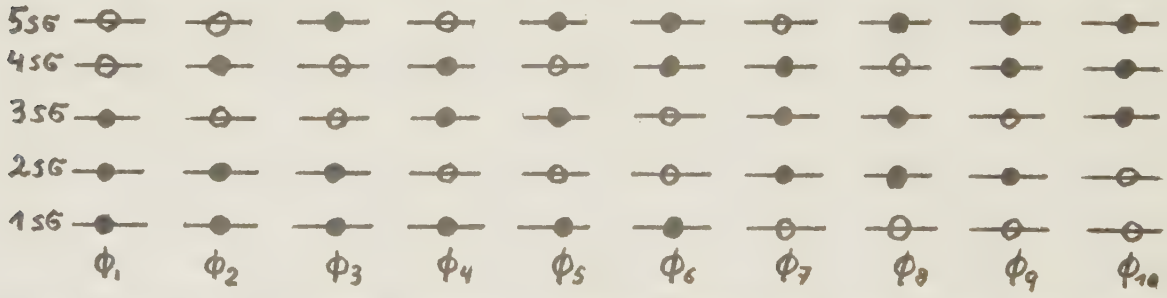
Rechnung getragen worden, sondern Stufenprozesse wie z. B.:



sind ebenfalls automatisch in den Wahrscheinlichkeits-amplituden enthalten.

6. WIRKUNGSQUERSCHNITTE

Nach der Bestimmung der zeitabhängigen Entwicklungskoeffizienten a (t) aus dem Satz der gekoppelten Kanalgleichungen lassen sich die Wahrscheinlichkeiten eines Konfigurationswechsels darstellen durch das Quadrat der Amplituden a (t). Da wir nicht so sehr in einer bestimmten Konfiguration als vielmehr an der völligen Ionisation einer Schale (z. B. K-Schale) interessiert sind, ergibt sich die jeweilige Schalenionisation durch eine Linearkombination der betreffenden Konfigurationswahrscheinlichkeiten. Als Beispiel mögen die zehn möglichen Konfigurationen bei fünf Zuständen und drei anwesenden Elektronen dienen.



Die K-Loch Ionisationswahrscheinlichkeit ist dann gegeben durch:

6.1 $$P_K = |\phi_7|^2 + |\phi_8|^2 + |\phi_9|^2 + |\phi_{10}|^2$$

Die L-Loch Wahrscheinlichkeit entsprechend durch:

6.2 $$P_L = |\phi_4|^2 + |\phi_5|^2 + |\phi_6|^2 + |\phi_{10}|^2$$

und so weiter.

Zur Berechnung des totalen Wirkungsquerschnittes benötigen wir die Ionisationswahrscheinlichkeit im Unendlichen (entsprechend a_n (t=∞)) bei verschiedenen Stoßparametern. Bei unseren Rechnungen wurden die Stoßparameter

b = 0, 2, 5, 7, 10, 12, 15, 17, 20, 25, 35, 40, 50, 60,

75, 85, 100, 125, 150, 175, 200, 300, 500, 1000 fm

berücksichtigt und als Stützstellen zur Berechnung des totalen Wirkungsquerschnittes benutzt.

Dieser ergibt sich durch Integration über alle möglichen Bahnen, d. h. bei allen Stoßparametern von b=0 bis b=∞ gemäß

6.3 $$\sigma = 2\pi \int_0^\infty b\,db\, P(t=\infty)$$

wobei der Faktor 2π die Raumwinkelintegration berücksichtigt.

Zur Berechnung der Wirkungsquerschnitte für Schalen höher als K müssen erstens mehr Zustände und zweitens größere Stoßparameter berücksichtigt werden. Die Figuren 20 und 21 zeigen den erwarteten exponentiellen Abfall mit wachsendem Stoßparameter. Tragen wir die Größe P(t= ∞)*b gegen den Stoßparameter auf, so zeigt die Funktion bei geringen Abständen ein Maximum und fällt dann exponentiell ab (vergleiche auch nachfolgende Tabelle).

	U-U	Pb-Pb
4 ⊖	0.146	0.186
3 ⊖	0.217	0.325
2 ⊖	0.284	0.448

Erläuterung: Ausgehend von fünf s Niveaus wurden die Schalen schrittweise - beginnend bei vier Elektronen und endend bei zwei Elektronen - entvölkert. Das Maximum wurde bei beiden Systemen bei etwa b=20 fm erreicht.

Durch parabolische Interpolation und anschließende Integration zwischen den angegebenen Stützstellen wurden die totalen Wirkungsquerschnitte für die verschiedenen Konfigurationen und Systeme errechnet. Da es zwei Möglichkeiten zur Spineinstellung gibt, müssen die Wirkungsquerschnitte noch mit dem Faktor 2 multipliziert werden.

7. ERGEBNISSE UND DISKUSSION

7.1 Allgemeiner Verlauf

Die K-Loch Wahrscheinlichkeitsamplituden zeigen im allgemeinen einen recht ähnlichen Verlauf. Dieser läßt sich in zwei typische Kurven zerlegen. Im einlaufenden Kanal werden erste Beiträge zur Ionisation erst bei zirka 100 fm, also relativ spät, geliefert. Es folgt dann ein leichtes Ansteigen der Kurve auf ein paar Prozent. Kurz vor Erreichen des Punktes größter Kernannäherung wird ein relatives Maximum erreicht, das jedoch bis zum Umkehrpunkt rasch wieder abfällt und die Kurve auf ein erstes Minimum bringt. Danach folgt im auslaufenden Kanal ein im allgemeinen steiler Anstieg auf wenigen Fermi Abstand, der beim Erreichen des absoluten Maximums (in der Regel unter 10 Prozent) endet. Dieses liegt bei Frontalstößen im U-U System bei etwa 80 fm und beim Pb-Pb System bei rund 100 fm. Der weitere Verlauf der Wahrscheinlichkeitsamplitude ähnelt dem einer gedämpften Schwingung. Nachdem die molekularen K-Schalen bei etwa 2000 fm Kernabstand wieder aufgebrochen werden und sich ihren atomaren Niveaus wieder nähern, erreichen die Schwingungen sehr schnell ihren konstanten, asymptotischen Endwert. Die Anzahl der Schwingungen gehen selten über drei Oszillationen im auslaufenden Kanal hinaus. Die erste große Oszillation hat eine Frequenz von zirka 300 fm beim U-U Stoß und eine solche von rund 400 fm beim Pb-Pb Stoß. Die zweite Oszillation beträgt mindestens das Doppelte der Ersten. Der asymp´totische Grenzwert beträgt etwa die Hälfte des Wertes des ersten Maximums. Das oszillierende Wesen der Amplituden und ihr erster steiler Anstieg läßt sich durch folgendes Modell verstehen. Im einlaufenden Kanal beginnen sich bei der Berührung der beiden atomaren K-Schalen (rund 2000 fm) langsam molekulare Orbitale einzustellen. Auf Grund der

Adiabatizität haben die Elektronen im Stoß dazu genügend Zeit (siehe Abschnitt 1.2 "Annahmen"). Ein großer Teil der Elektronendichtewolke fließt in Richtung des Zentrums der Verbindungsachse der beiden Kerne und folgt damit deren Bewegung. Am Punkte größter Kernannäherung ändert die Geschwindigkeit der Kerne plötzlich ihr Vorzeichen. Diese Umkehrung wirkt quasi wie ein sehr starker Schlag auf das System. Die K-Elektronendichtewolke ist nicht der Lage, ihre Bewegung innerhalb dieser kurzen Zeit ebenfalls umzukehren. Sie bleibt kurzzeitig hinter den Kernen zurück, gerät in eine Art gedämpfte Schwingung und verteilt sich auf andere Zustände. Nach einer gewissen Zeit, die etwa der Zeit entspricht, nach der die Stoßpartner mit ihrer niedrigsten Schale ihren atomaren Charakter wiedererlangen, hat sich die Elektronendichtewolke in ihrer Bewegung beruhigt, und ihre Aufenthaltswahrscheinlichkeit erreicht einen konstanten Wert.

Betrachtet man nur die Wahrscheinlichkeitsamplituden von verschiedenen Konfigurationen und nicht die der gesamten K-Loch Produktion , so kann das Bild durchaus verschieden sein (siehe auch Fig 19a Nr 2,3,4; Fig 19b Nr 4,5,6; Fig 19c Nr 4,5,6). Dies hat seinen Ursprung in der verschieden großen Stärke der einzelnen Matrixelemente, der Wechselwirkung der Zustände untereinander und der Möglichkeit stufenweiser Ionisation. Es ist dies ein Wesenszug der gekoppelten Kanalgleichungen.

7.2 Konvergenzverhalten bei variierender Elektronenanzahl (Fig 6, 8, 11)

Als festen Satz von Basiszuständen wurden 1 s, 2 s, 3 s, 4s, und 5 s gewählt. Ausgehend von einem Elektron im 1 s Zustand wurden immer mehr Elektronen von unten her aufgefüllt, bis nur noch der 5 s Zustand unbesetzt war. Den stärksten Sprung gab es hierbei vom Ein-Elektronen- zum Zwei-Elektronen Problem. Er lag in der Asymptotik bei beiden untersuchten Systemen zwischen 5 und 6 Prozent und war beim Blei-Blei System sogar noch etwas größer als beim System Uran-Uran. Deshalb liegen beim leichteren Pb-Pb System die weiteren Amplituden nicht ganz so dicht wie beim U-U Fall. Dort offenbart sich ein sehr gutes Konvergenzverhalten mit wachsender Elektronenanzahl, das bei etwa 1 Prozent enden wird, bzw. 2 Prozent, trägt man beiden Spinrichtungen Rechnung.

7.3 Konvergenzverhalten bei variierender Zustandszahl (Fig 7, 12)

Es wurde das Verhalten von zwei Elektronen in den untersten Schalen bei drei, vier und fünf möglichen Zuständen (1s-5s). Bei beiden Systemen ist bei einer wachsenden Anzahl von Zuständen eine steigende Ionisationsrate zu beobachten, die offensichtlich auch gut konvergiert. Am Umkehrpunkt beträgt die K-Loch Wahrscheinlichkeit sowohl im Pb-Pb als auch im U-U System zwischen 0.5 und 1 Prozent. Asymptotisch ist mit einer Lochrate von knapp 3 Prozent im Uran System und von etwas über 5 Prozent im leichteren Blei System zu rechnen. Die vorliegenden Werte gelten für einen Frontalstoß, d. h. für Stoßparameter b = 0 fm.

7.4 Verhalten bei verschiedenen Einschußenergien (Fig 9, 13)

Basis waren in beiden Systemen die untersten 5 s Zustände, die anfänglich von 1 s bis 3 s mit jeweils einem Elektron besetzt waren. Ins Auge fällt die relativ starke Energieabhängigkeit der K-Loch Wahrscheinlichkeit. Alle 200 MeV fällt sie beim Uran System jeweils um rund die Hälfte. Einschußenergien unterhalb E lab = 800 MeV dürften in diesem Falle nicht verwendet werden, , um eine asymptotische Ionisationsrate im Prozentbereich zu erhalten. Im Blei-Blei Stoß verringert sich die Endwahrscheinlichkeit anfangs, d. h. bei großen Energien (E lab = 950 MeV) beginnend sogar alle 100 MeV um die Hälfte. Bei Einschußenergien überhalb 2 MeV/Nukleon dürfte hierbei der interessante Bereich für die K-Loch Produktion liegen. Die Maxima sind bei beiden Systemen - wenn überhaupt nur minimal gegeneinander verschoben. Die Frequenz der Oszillationen ist, besonders bei U-U annähernd bei allen Einschußenergien konstant.

7.5 Asymptotisches Verhalten bei verschiedenen Einschußenergien (Fig 15, 17)

Von fünf möglichen Zuständen sind die drei untersten besetzt. Der Stoßparameter wurde gleich Null gesetzt. Beide Systeme zeigen eine zwar fallende Tendenz mit geringer werdenden Energien, jedoch sind die Strukturen verschieden. Bei Uran-Uran sehen wir einen stetigen raschen Abfall der K-Loch Wahrscheinlichkeit, der bei zirka 500 MeV fast senkrecht nach unten verläuft. Das experimentell verwendbare Energieband verläuft daher von 500 MeV bis knapp unter die Coulomb Barriere (wegen der auftretenden Kernkräfte). Bei

Blei-Blei bietet sich von 950 MeV bis 750 MeV ein ähnliches Bild wie bei Uran-Uran, doch flacht der Kurvenverlauf dann merklich ab zu fast einem Plateau im Energiebereich 750 MeV bis ungefähr 550 MeV. Danach folgt ein steiler Absturz, der bei Einschußenergien unterhalb 450 MeV fast senkrecht verläuft. Daher hat es erst Sinn, K-Loch Wahrscheinlichkeiten im Blei System zu messen bei Energien überhalb 550 MeV. Bei Energien über 750 MeV erhöht sich die Ionisationsrate der K-Schale dann noch beträchtlich.

7.6 Verhalten bei verschiedenen Stoßparametern

(Fig 10, 14)

Bei beiden Stoßsystemen war die Anfangskonfiguration einheitlich. Besetzt waren der 1 s, 2 s und 3 s Zustand, die Niveaus 4 s und 5 s waren jedoch leer. Bei U-U betrug die Einschußenergie 1100 MeV und bei Pb-Pb lag sie bei 936 MeV, was in etwa der gleichen Energie/Nukleon entspricht. Berechnet wurden die Amplituden für zirka 20 verschiedene Stoßparameter, von denen jedoch nur einige der unteren der Übersicht halber gezeichnet wurden (0, 10, 20, 35, 50 fm). Auch hier fällt wieder eine starke Abhängigkeit vom untersuchten Parameter auf. Im einlaufenden Kanal ist die Ionisierungsrate bei U-U um einiges stärker als bei Pb-Pb. In der Asymptotik ist es jedoch umgekehrt. Dort gilt ungefähr (siehe auch Tabelle):

$$P^{Pb-Pb}(\infty) \approx 2 * P^{U-U}(\infty)$$

Die Stoßparameterabhängigkeit ist demnach bei Pb-Pb relativ schwächer. Bei Stoßparametern über 150 fm ist die Ionisationsrate in beiden Fällen so gut wie Null. Für die Frequenz und die Abstandspunkte der Maxima und Minima gilt

in etwa das gleiche wie für das Verhalten bei verschiedenen Einschußenergien.

b(fm)	U-U	Pb-Pb
0	1.75	3.4
10	1.50	2.5
20	1.10	1.9
35	0.45	0.8
50	0.25	0.5

Asymptotische K-Loch Wahrscheinlichkeit in Prozent

7.7 Asymptotisches Verhalten bei verschiedenen Stoßparametern (Fig 16, 18)

Aufgetragen wurde die Endwahrscheinlichkeit für drei verschiedene Anfangskonfigurationen als Funktion des Stoßparameters. Fünf Zustände wurden nacheinander mit 2, 3, und 4 Elektronen in den unteren Schalen bevölkert. Die Kurven für verschiedene Konfigurationen zeigen pro Stoßystem einen ähnlichen, ja fast parallelen Verlauf und fallen in guter Näherung - besonders bei U-U - exponentiell ab. Bei kleinen Stoßparametern ($b < 10$ fm) ist eine gewisse Stagnation in der Endwahrscheinlichkeit festzustellen, die jedoch bei Pb-Pb nicht ganz so stark ausgeprägt ist. Danach folgt ein stetiger Abfall der K-Loch Erzeugungsrate, der bei Stoßparametern mit $b > 150$ fm in beiden Systemen bereits eine Endwahrscheinlichkeit von weniger als 0.001 Prozent bedingt.

7.8 Konfigurationsamplituden;

Doppelstoß und Einzelstoß (Fig 19a, b, c)

Wie unter Abschnitt 7.1 "Allgemeiner Verlauf" bereits erwähnt, zeigen sich beim Plotten von Konfigurationsamplituden recht unterschiedliche Strukturen, die sich auf Grund der einzelnen Kopplungen der Zustände und Konfigurationen nicht mehr überschauen und anschaulich erklären lassen. Dies liegt am komplexen Wesen der gekoppelten Kanalgleichungen. Beim Zeichnen der gesamten K-Loch Wahrscheinlichkeit verschwinden diese Eigenarten allerdings wieder und zeigen den alten Verlauf im ein- und auslaufenden Kanal.

Die anfängliche Konfiguration in Fig 17b wurde als Ausgangsposition genommen für den in Fig 17c dargestellten Doppelstoß. Ziel dieser Rechnung war es, eine obere Grenze der K-Loch Wahrscheinlichkeit im Doppelstoß zu finden. Es wurde daher als Anfangskonfiguration des zweiten Stoßes nicht die asymptotische, sondern die maximal erreichte K-Loch Rate im ersten Stoß gewählt. Für die drei Konfigurationen, die zur K-Loch Produktion beitragen, ergaben sich demzufolge die in der linken oberen Hälfte von Fig 17c angegebenen Besetzungswahrscheinlichkeiten. Sie sind auch verantwortlich für das oszillierende Verhalten der Elektronendichtewolke im einlaufenden Kanal des zweiten Stoßes, da sie dort erneut angeregt wird. Der "Schlag" beim Punkt der größten Kernannäherung ist daher auch nicht so groß wie beim ersten Stoß, da die Elektronendichtewolke bereits schwingt und nicht nur radial

nach innen auf die Kerne zufliegt. Der "Stoß" ist aber immerhin noch so stark, daß er die Wahrscheinlichkeit auf knapp 25 Prozent aufschaukelt und sie sich schließlich in der Asymptotik bei rund 20 Prozent einschwingen läßt. Die Einschußenergie betrug bei diesem Modell des zentralen U-U Stoßes E lab = 1600 MeV.

7.9 Wirkungsquerschnitte (Fig 20a,b; 21a,b)

Die Wirkungsquerschnitte wurden für beide Systeme für jeweils drei verschiedene, realistische Konfigurationsmöglichkeiten berechnet (siehe auch Kapitel 6). Die Kurven für P_∞ *b als Funktion von b zeigen einen natürlichen Verlauf. Bei kleinen Stoßparametern folgt ein steiler Anstieg, der bei etwa b = 20 fm sein Maximum erreicht und dann exponentiell abfällt. Bei Anwesenheit von vier Elektronen erreicht die Funktion P_∞ *b schon bei b > 150 fm den Wert Null, bei nur zwei Elektronen ist das jedoch erst bei b > 200 fm (U-U) bzw b > 300 fm (Pb-Pb) der Fall. Nach erfolgter Integration muß nicht nur noch mit 2 π malgenommen werden, sondern der Wirkungsquerschnitt muß wegen der beiden Möglichkeiten der zur Spineinstellung noch verdoppelt werden. Es ergaben sich folgende Wirkungsquerschnitte in barn:

	U-U	σ	Pb-Pb
2 $\ominus$	1.98		4.05
3 $\ominus$	1.56		2.49
4 $\ominus$	0.97		0.76

Es besteht der ungefähre Zusammenhang:

2 ⊖	$\sigma_{Pb} = 2.0\ \sigma_u$
3 ⊖	$\sigma_{Pb} = 1.6\ \sigma_u$
4 ⊖	$\sigma_{Pb} = 0.75\ \sigma_u$

7.10 Anregungen ins Kontinuum (Fig 22,23)

In Fig 22 ist die Anregungswahrscheinlichkeit des 1 s Elektrons ins positive Kontinuum dargestellt. Die Einschußenergie betrug beim Frontalstoß im System U-U 1600 MeV. Die Emission erfolgte in ein um 1.4 Elektronenmassen zentriertes Energieband. Auch bei der Anregung ins Kontinuum zeigt sich wiederum der typische Amplitudenverlauf. Im Eingangskanal haben wir einen betont starken Anstieg, der bei rund 30 fm Kernabstand ein Maximum von 1.3 Prozent erreicht und auf den nächsten 15 fm herabsinkt auf 0.8 Prozent. Danach erfolgt wiederum der Umkehrstoß, der ein Ansteigen auf 5.4 Prozent bewirkt. Im Gegensatz zu den Übergängen zwischen den gebundenen Zuständen allein, wird das Maximum bereits schon bei 40 fm erreicht. Das zweite Maximum wird bei 190 fm durchlaufen, was einer Frequenz von 150 fm entspricht. Das dritte Maximum liegt bei ziemlich genau 400 fm. Schon bei Abständen größer als 800 fm erreicht die Ionisationsamplitude ihren konstanten Endwert von 2 Prozent. Die obere Kurve entspricht der mit dem Faktor 2 malgenommenen unteren Kurve und verkörpert die K-Loch Wahrscheinlichkeit beider 1 s Elektronen.

In Fig 23 wurden vier gebundene Zustände sowie auch die Wechselwirkungen zwischen ihnen und dem Kontinuum berücksichtigt. In der negativen Asymptotik ($t=-\infty$) wurden alle vier Zustände als besetzt angenommen. Die erste Elektronenanregung muß also ins Kontinuum erfolgen. Das Emissionsband im Kontinuum wurde belassen. Die Anwesenheit mehrerer Zustände, die Möglichkeit ihrer Wechselwirkungen untereinander und die daraus resultierenden Stufenanregungsprozesse dämpfen naturgemäß die K-Loch Produktionsrate etwas. Das erste Maximum ist leicht verschoben (45 fm) und beträgt 4.4 Prozent. Die Asymptotik ändert sich jedoch so gut wie nicht (1.8 Prozent).

Zum Vergleich wurde ebenfalls aufgetragen, wie die L-Loch Produktion im Stoß abläuft. Die Wahrscheinlichkeit hierfür zeigt im Prinzip diesselbe Struktur wie die K-Loch Amplitude. Beim Punkt größter Kernannäherung beträgt sie jedoch bereits 8.4 Prozent. Im auslaufenden Kanal erfolgt ein sehr steiler Anstieg, der bei 120 fm sein Maximum von 38.4 Prozent erreicht. Es findet allerdings eine sehr starke Dämpfung statt, die nur eine Oszillation der Frequenz 400 fm zuläßt. Danach wird rasch (bei etwa 1000 fm) der Endwert von 35 Prozent erreicht. Dies zeugt sowohl von einer ebenfalls starken Sensibilität der L-Elektronendichtewolke am Umkehrpunkt als auch für eine trägere Stabilisation der L-Wolke (nur eine Oszillation, große Frequenz).

7.11 Die Rotationskopplung (Fig 24,25)

Die Beschreibung der 2 p 1/2 Ionisation durch die radiale Kopplung allein langt nicht aus, um die Experimente richtig zu erklären. So findet z. B. Greenberg et al (Ref 40) bei der Stoßparameterabhängigkeit einen Peak bei kleinen Abständen (rund 20 fm). Mit Hilfe der Rotationskopplung ist es allerdings möglich, die beobachtete Struktur zu erklären.

Ausgangsbasis der Rechnungen waren die sechs p-Zustände der L-Schale: 2 p 1/2 $\pm\sigma$, 2 p 3/2 $\pm\sigma$, und 2 p 3/2 $\pm\pi$. Alle Kopplungsmechanismen zwischen diesen Zuständen auf Grund der Rotation wurden berücksichtigt. Es wurden zu Anfang des Stoßes Löcher im 2 p 3/2 π Zustand agenommen. Bei kleinen Kernabständen in der Nähe des Umkehrpunktes besteht über die starke Rotationskopplung zwischen 2 p 3/2 σ und 2 p 3/2 π eine große Wahrscheinlichkeit, daß ein Loch in das 2 p 3/2 σ Niveau wandert. Im auslaufenden Kanal kommt allerdings bei mittleren Abständen (rund 500 fm) wieder die radiale Kopp-

lung zwischen 2 p 3/2 σ und 2 p 1/2 σ zum Tragen (Ref 26), die verantwortlich ist für die asymptotisch beobachtete 2 p 1/2σIonisation.

Trägt man diese Wahrscheinlichkeit als Funktion des Stoßparameters auf, so ergeben sich die gestrichelten Kurven in Fig 25. Sie zeigen im auslaufenden Kanal ein Maximum bei etwa 10 fm. Danach fällt P_{∞}(b) wieder ab und steigt dann wieder langsam zu einem erneuten aber breitem Maximum bei großen Stoßparametern an (Z. B. U-U: 175 fm). Addiert man zu P_{∞}(b) noch die Wahrscheinlichkeit der direkten Ionisation des 2 p 1/2 σ Niveaus, so erhält man die durchgezogenen Kurven in Fig 25. Die vorliegenden gekoppelten Kanalrechnungen waren in der Lage, die Struktur der experimentellen Ergebnisse zu erklären und zu reproduzieren. Die einzige Differenz, die derzeit noch besteht, ist die unterschiedliche Lage des Maximums (Theorie 10 fm, Experiment 20 fm).

Wie man sieht, haben wir in der 2 p 1/2 σ Ionisation einen dominanten Prozeß während des Stoßes vor uns. Deutlich wird dies bei einem Vergleich der asymptotischen Wahrscheinlichkeiten für 1 s σ und 2 p 1/2σIonisation für die Systeme U-U, Pb-Pb und U-Pb im zentralen Stoß (Angaben in Prozent):

4.7 MeV/Nucl	U-U	Pb-Pb	U-Pb
1 s σ	8.5	4.0	2.4
2 p 1/2 σ	12.5	43.0	34.0

Ein nicht unbedeutender Beitrag zum totalen Ionisationswirkungsquerschnitt ist vom zweiten Teil der Kurve P(b), dem Gebiet des breiten Maximums, zu erwarten. Zur Unterscheidung zwischen den Beiträgen der direkten Ionisation und der

Rotationskopplung zur Gesamt-Ionisationswahrscheinlichkeit sind deshalb Koinzidenzmessungen notwendig (Ref 42).

8. AUSBLICK

Die Vorgänge um die Radial- und Rotationskopplung zwischen den gebundenen Zuständen sind mittlerweile im Großen und Ganzen erklärt und verstanden. Die Rechnungen dazu können mehr oder weniger als abgeschloßen gelten. Es müssen allerdings noch einige Rechnungen für die Experimente gemacht werden.

Weitergehenden Betrachtungen bedarf die Emission der Elektronen ins Kontinuum, wobei mehr Kontinuumszustände berücksichtigt werden sollten. Dies trifft für beide Kopplungsmechanismen zu. Vom Ausgang dieser Rechnungen ist noch ein unter Umständen gar nicht so kleiner Beitrag zur K-Loch Produktion zu erwarten.

Mit Interesse darf man auf die Ergebnisse der gekoppelten Kanalrechnungen für die Photon-Emission im SI-Stoß warten. Das elektromagnetische Feld wird über die minimale Kopplung in die TCD-Gleichung eingebaut:

$$\vec{p} \longrightarrow \vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}$$

Da die Strahlungskopplung keine allzu große Störung darstellt, ist es hinreichend, nur Ein-Photonenzustände in die Rechnung mit einzubeziehen. Eine derartige Wellenfunktion wäre von der Gestalt:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t)\, e^{-i\int_{-\infty}^{t} dt' E_n(t')} |\phi_n\rangle |0\rangle +$$

$$+ \sum_{n,\vec{k},\mu} c_{n,\vec{k}\mu}(t)\, e^{-i\int_{-\infty}^{t} dt' (E_n(t')+\omega)} |\phi_n\rangle \hat{a}_{\vec{k}\mu} |0\rangle$$

Die c-Koeffizienten stellen die Wahrscheinlichkeitsamplitude

dafür da, ein Elektron aus der Konfiguration $|\phi_n\rangle$ zusammen mit einem Photon mit Wellenvektor $\vec{k}$ und Polarisation μ im System vorzufinden.

R. K. Smith (Ref 10) stellte dazu die gekoppelten Kanalgleichungen auf:

$$\dot{a}_m = -\sum_n a_n(t) \langle \phi_m | \frac{\partial}{\partial t} | \phi_n \rangle e^{i\int_{-\infty}^{t} dt'(E_m - E_n)} -$$

$$- i \sum_n \langle \phi_m | H_{rad} | \phi_n \rangle e^{i\int_{-\infty}^{t} dt'(E_m - E_n - \omega)} c_{n,\vec{k}\mu}$$

$$\dot{c}_{m,\vec{k}\mu} = -i \sum_n \langle \phi_m | H_{rad} | \phi_n \rangle e^{i\int_{-\infty}^{t} dt'(E_m - E_n - \omega)} a_n(t) -$$

$$- \sum_n \langle \phi_m | \frac{\partial}{\partial t} | \phi_n \rangle e^{i\int_{-\infty}^{t} dt'(E_m - E_n)} c_{n,\vec{k}\mu}$$

Dabei ist $H_{rad} = \vec{j} * \vec{A} - e * \vec{\alpha} * \vec{A}$

Vernachläßigt man den relativ kleinen Term

$$\sum_n \langle \phi_m | \frac{\partial}{\partial t} | \phi_n \rangle e^{i\int_{-\infty}^{t} dt'(E_m - E_n)} c_{n,\vec{k}\mu}$$

so wird in der Dipolnäherung mit $\vec{A} = \vec{\varepsilon}_\mu$:

$$c_{m,\vec{k}\mu}(\omega) = i \int_{-\infty}^{+\infty} dt \sum_n \sqrt{\frac{2\pi}{\omega}}\, \vec{\varepsilon}_\mu \cdot \langle \phi_m | R(\theta_n) \vec{\nabla} | \phi_n \rangle e^{i\int_{-\infty}^{t} dt'(E_m - E_n + \omega)} \cdot a_n(t)$$

Hier können dann die in der vorliegenden Arbeit vorgestellten Loch-Wahrscheinlichkeitsamplituden $a_m(t)$ direkt eingesetzt und integriert werden.

Der differentielle Wirkungsquerschnitt für die Photonenemission , gemittelt über alle möglichen Polarisationen ist dann gegeben durch:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{ion}} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega_{ion}}\right)_{scatt} \sum_{m,\mu} |c_{m,\vec{k}\mu}(\infty)|^2 k^2 dk$$

Ähnlich liegen die Voraussetzungen für die Berechnungen des Autoionisationsprozesses und dem Zerfall des neutralen Vakuums(Ref 38, 39).

Die Positron-Wahrscheinlichkeitsamplitude ist in diesem Fall gegeben durch:

$$c(E) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt\, e^{i\int_{-\infty}^{t} dt'(E-E_{1s}(t')) - \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{t} dt'\,\Gamma(t')} \cdot M_E(t)$$

mit dem Matrixelement

$$M_E(t) = \begin{cases} -\langle \psi_E(t) | \partial/\partial t | \phi(t) \rangle & |t| > t_{cr} \\ i V_E(t) & |t| \leq t_{cr} \end{cases}$$

und den Abkürzungen

$$E(R) = \langle \phi_{cr} | V(R) | \phi_{cr} \rangle \qquad V_E = \langle \psi_E^{cr} | V(R) | \phi_{cr} \rangle$$

V(R) = H(R) - H(R cr) ist das diskretisierte Potential.

Die Wahrscheinlichkeit für die Produktion eines Positrons im Energiebereich E und E + dE ist dann:

w(E,θ) dE = |c(E)| **2 dE

Der differentielle Wirkungsquerschnitt lautet:

$$\frac{d\sigma}{dE\, d\Omega_{ion}} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega_{ion}}\right)_{scatt} \cdot L_0 \cdot W(E,\theta)$$

Lo wurde bei den bisherigen Rechnungen angenommen zu Lo = 0.01 (Ref 20). Auch in diesem Fall lassen sich die bis jetzt durchgeführten Rechnungen mit den tatsächlichen Wahrscheinlichkeitsamplituden entsprechend modifizieren.

ZUSAMMENFASSUNG

Zum ersten Mal wurden mit Hilfe gekoppelter Kanalgleichungen K-Loch Wahrscheinlichkeiten berechnet und zwar auch für mehrere Zustände (Gebundene und Kontinuum) und mehrere Elektronen. Davor reichten die Schätzungen der K-Loch Wahrscheinlichkeiten bei U-U Stößen (E lab = 1500 MeV) von 4*10**-6 bis 10**-1 (Ref 35, 36, 37). Die Ergebnisse liegen teilweise um eine Größenordnung über den optimistischsten Erwartungen. Zwischen den betrachteten Zuständen wurden alle erlaubten Kopplungen untersucht und berücksichtigt. Die anschließend bestimmten Wirkungsquerschnitte sind von einer Größenordnung, die auf gute experimentelle Ergebnisse hoffen läßt. Teilweise befinden sich bereits Theorie und Experiment in erstaunlich guter Übereinstimmung. Die bestätigte Konvergenz in den Rechnungen bei Hinzunahme von mehr Zuständen läßt die Beschränkung auf die jeweiligen maximal verwendeten Zustände gerechtfertigt erscheinen. Der benutzte Computer-Code, insbesondere die Behandlung des Problems der gekoppelten Kanäle mit Hilfe des Hammings Prediktor-Korrektor Verfahrens mit vorgeschaltetem Runge-Kutta Verfahren zur Bestimmung der Startwerte ist schnell und genau. Die geforderte Genauigkeit wurde bereits bei einem nicht allzu großen Satz von Stützstellen und minimalen Halbierungspunkten erreicht. Die verbrauchte CPU-Zeit betrug bei der Verwendung von sechs Zuständen (entsprechend 12 gekoppelten Differentialgleichungen) mit Compilierung in der Regel weniger als 15 Sekunden. Auch bei Kontinuumsrechnungen, bei denen teilweise bis 30 Kanäle berücksichtigt wurden, war die verbrauchte CPU-Zeit innerhalb vertretbarer Grenzen. Dies dürfte von einiger Bedeutung sein bei der Fortführung der Kontinuumsrechnungen unter Mitnahme von noch mehr Kontinuumszuständen.

ANHANG A

Die Coulomb-Trajektorie

Zur Beschreibung der Kern-Bahnbewegung wurden Rutherford Hyperbeln in der Parametrisierung verwendet:

$$R = R_{min} (\varepsilon \cdot \cosh x + 1)$$

$$t = \frac{R_{min}}{v_\infty} (\varepsilon \cdot \sinh x + x)$$

R min ist die Hälfte des Abstandes größter Kernannäherung bei einem Zentralstoß (b=0).

Im Center of Mass System gilt:

R min = (Z_p * Z_T * e**2)/ E cm

wobei zwischen der Einschußenergie im CM-System und im Lab-System der folgende Zusammenhang besteht:

$$E_{cm} = \frac{m_T}{m_T + m_p} \cdot E_{Lab}$$

ε ist die Exzentrizität der Bahn:

$$\varepsilon^2 = 1 + \frac{b^2}{R_{min}^2}$$

v_∞ ist die Einschußgeschwindigkeit des Projektilds.

Der Abstand größter Kernannäheung als Funktion des Stoßparameters b ergibt sich zu:

$$R_{clos} = R_{min} (\varepsilon + 1) = \sqrt{R_{min}^2 + b^2} + R_{min}$$

Die radiale Bahngeschwindigkeit erhält man über

$$\frac{dR}{dx} = R_{min} \cdot \varepsilon \cdot \sinh x$$

und

$$\frac{dt}{dx} = \frac{R_{min}}{V_\infty}\left(\varepsilon \cdot \cosh x + 1\right) = \frac{R}{V_\infty}$$

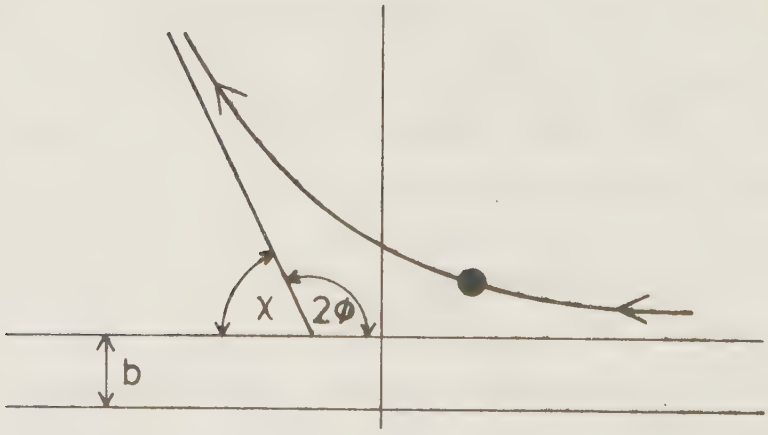
zu

$$V = \frac{dR}{dt} = \frac{dR}{dx} \cdot \frac{dx}{dt} = V_\infty \cdot \frac{\varepsilon \cdot \sinh x}{(\varepsilon \cdot \cosh x + 1)}$$

Die nachfolgende Zeichnung veranschaulicht die Bahngeometrie.

$$e = \frac{1}{\sin \theta_{lab}} = \frac{1}{\cos \phi} \quad , \quad \theta_{lab} = \frac{\chi}{2}$$

$$2\phi = \pi - \chi$$



ANHANG B

Matrixelemente verschiedener Konfigurationen

Am Beispiel von vier s-Zuständen, die mit zwei Elektronen besetzt sind, wollen wir uns den Übergang von Matrixelementen zwischen Konfigurationen zu solchen zwischen gebundenen Zuständen verdeutlichen.

Ausgangspunkt seien folgende Konfigurationen:

Sie werden beschrieben durch die Slaterdeterminanten

$$\phi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \varphi_{1s}(1) & \varphi_{1s}(2) \\ \varphi_{2s}(1) & \varphi_{2s}(2) \end{vmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\varphi_{1s}^{(1)} \varphi_{2s}^{(2)} - \varphi_{1s}^{(2)} \varphi_{2s}^{(1)} \right)$$

$$\phi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \varphi_{1s}(1) & \varphi_{1s}(2) \\ \varphi_{3s}(1) & \varphi_{3s}(2) \end{vmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\varphi_{1s}^{(1)} \varphi_{3s}^{(2)} - \varphi_{1s}^{(2)} \varphi_{3s}^{(1)} \right)$$

Die Gesamtwellenfunktion ist dann von der Form:

$$\Psi = \sum_i c_i \phi_i$$

wobei der Index i wieder über alle möglichen Besetzungsvarianten läuft. Der radiale Übergang zwischen Konfiguration 1 und 2 wird dann beschrieben durch $\langle \phi_1 | \partial/\partial R | \phi_2 \rangle$, wobei der Operator $\partial/\partial R$ als Summe von Einteilchenoperatoren zu verstehen ist, also $\frac{\partial}{\partial R} = \frac{\partial}{\partial R_1} + \frac{\partial}{\partial R_2}$

Danach ergibt sich:

$$\langle \phi_1 | \frac{\partial}{\partial R_1} + \frac{\partial}{\partial R_2} | \phi_2 \rangle = \frac{1}{2} \int \left[\varphi_{1s}^{+(1)} \varphi_{2s}^{+(2)} - \varphi_{1s}^{+(2)} \varphi_{2s}^{+(1)} \right] \left(\frac{\partial}{\partial R_1} + \frac{\partial}{\partial R_2} \right) \left[\varphi_{1s}^{(1)} \varphi_{3s}^{(2)} - \varphi_{1s}^{(2)} \varphi_{3s}^{(1)} \right] d\tau_1 d\tau_2$$

$$\frac{1}{2} \Big\{ \int \varphi_{1s}^{+(1)} \varphi_{2s}^{+(2)} \left(\frac{\partial}{\partial R_1} + \frac{\partial}{\partial R_2} \right) \varphi_{1s}^{(1)} \varphi_{3s}^{(2)} d\tau_1 d\tau_2 - \int \varphi_{1s}^{+(1)} \varphi_{2s}^{+(2)} \left(\frac{\partial}{\partial R_1} + \frac{\partial}{\partial R_2} \right) \varphi_{1s}^{(2)} \varphi_{3s}^{(1)} d\tau_1 d\tau_2$$

$$- \int \varphi_{1s}^{+(2)} \varphi_{2s}^{+(1)} \left(\frac{\partial}{\partial R_1} + \frac{\partial}{\partial R_2} \right) \varphi_{1s}^{(1)} \varphi_{3s}^{(2)} d\tau_1 d\tau_2 + \int \varphi_{1s}^{+(2)} \varphi_{2s}^{+(1)} \left(\frac{\partial}{\partial R_1} + \frac{\partial}{\partial R_2} \right) \varphi_{1s}^{(2)} \varphi_{3s}^{(1)} d\tau_1 d\tau_2 \Big\}$$

$$= \frac{1}{2} \Big\{ \int \varphi_{1s}^{+(1)} \varphi_{2s}^{+(2)} \frac{\partial}{\partial R_1} \varphi_{1s}^{(1)} \varphi_{3s}^{(2)} d\tau_1 d\tau_2 + \int \varphi_{1s}^{+(1)} \varphi_{2s}^{+(2)} \frac{\partial}{\partial R_2} \varphi_{1s}^{(1)} \varphi_{3s}^{(2)} d\tau_1 d\tau_2 + \cdots \Big\}$$

$$= \frac{1}{2} \Big\{ \int \varphi_{1s}^{+(1)} \frac{\partial}{\partial R_1} \varphi_{1s}^{(1)} d\tau_1 \int \varphi_{2s}^{+(2)} \varphi_{3s}^{(2)} d\tau_2 + \int \varphi_{2s}^{+(2)} \frac{\partial}{\partial R_2} \varphi_{3s}^{(2)} d\tau_1 \int \varphi_{1s}^{+(1)} \varphi_{1s}^{(1)} d\tau_1 + \cdots \Big\}$$

$$= \frac{1}{2} \Big\{ \qquad 0 \qquad + \quad \langle 2s | \frac{\partial}{\partial R} | 3s \rangle + \cdots \Big\}$$

und analog für die anderen Terme:

$$\frac{1}{2} \Big\{ \cdots - \int \varphi_{1s}^{+(1)} \varphi_{2s}^{+(2)} \frac{\partial}{\partial R_1} \varphi_{1s}^{(2)} \varphi_{3s}^{(1)} d\tau_1 d\tau_2 - \int \varphi_{1s}^{+(1)} \varphi_{2s}^{+(2)} \frac{\partial}{\partial R_2} \varphi_{1s}^{(2)} \varphi_{3s}^{(1)} d\tau_1 d\tau_2 + \cdots \Big\}$$

$$= \frac{1}{2} \Big\{ \cdots - \int \varphi_{1s}^{+(1)} \frac{\partial}{\partial R_1} \varphi_{3s}^{(1)} d\tau_1 \int \varphi_{2s}^{+(2)} \varphi_{1s}^{(2)} d\tau_2 - \int \varphi_{2s}^{+(2)} \frac{\partial}{\partial R_2} \varphi_{1s}^{(2)} d\tau_2 \int \varphi_{1s}^{+(1)} \varphi_{3s}^{(1)} d\tau_1 + \cdots \Big\} = 0$$

$$\frac{1}{2} \Big\{ \cdots - \int \varphi_{1s}^{+(2)} \varphi_{2s}^{+(1)} \frac{\partial}{\partial R_1} \varphi_{1s}^{(1)} \varphi_{3s}^{(2)} d\tau_1 d\tau_2 - \int \varphi_{1s}^{+(2)} \varphi_{2s}^{+(1)} \frac{\partial}{\partial R_2} \varphi_{1s}^{(1)} \varphi_{3s}^{(2)} d\tau_1 d\tau_2 + \cdots \Big\}$$

$$= \frac{1}{2} \Big\{ \cdots - \int \varphi_{2s}^{+(1)} \frac{\partial}{\partial R_1} \varphi_{1s}^{(1)} d\tau_1 \int \varphi_{1s}^{+(2)} \varphi_{3s}^{(2)} d\tau_2 - \int \varphi_{1s}^{+(2)} \frac{\partial}{\partial R_2} \varphi_{3s}^{(2)} d\tau_2 \int \varphi_{2s}^{+(1)} \varphi_{1s}^{(1)} d\tau_1 + \cdots \Big\} = 0$$

$$\frac{1}{2} \Big\{ \cdots + \int \varphi_{1s}^{+(2)} \varphi_{2s}^{+(1)} \frac{\partial}{\partial R_1} \varphi_{1s}^{(2)} \varphi_{3s}^{(1)} d\tau_1 d\tau_2 + \int \varphi_{1s}^{+(2)} \varphi_{2s}^{+(1)} \frac{\partial}{\partial R_2} \varphi_{1s}^{(2)} \varphi_{3s}^{(1)} d\tau_1 d\tau_2 \Big\}$$

$$= \frac{1}{2} \Big\{ \cdots + \int \varphi_{2s}^{+(1)} \frac{\partial}{\partial R_1} \varphi_{3s}^{(1)} d\tau_1 \int \varphi_{1s}^{+(2)} \varphi_{1s}^{(2)} d\tau_2 + \int \varphi_{1s}^{+(2)} \frac{\partial}{\partial R_2} \varphi_{1s}^{(2)} d\tau_2 \int \varphi_{2s}^{+(1)} \varphi_{3s}^{(1)} d\tau_1 \Big\}$$

$$= \frac{1}{2} \Big\{ \cdots + \quad \langle 2s | \frac{\partial}{\partial R} | 3s \rangle \quad + \quad 0 \Big\}$$

Es ergibt sich somit:

$$\langle \phi_1 | \frac{\partial}{\partial R} | \phi_2 \rangle = \frac{1}{2} \left\{ \langle 2s | \frac{\partial}{\partial R} | 3s \rangle + \langle 2s | \frac{\partial}{\partial R} | 3s \rangle \right\}$$

$$= \langle 2s | \frac{\partial}{\partial R} | 3s \rangle$$

Für die Energien im Phasenintegral $\exp + i \int_{-\infty}^{t} dt (E_f - E_i)$ sind ebenfalls die entsprechenden Energien des 2 s und des 3 s Zustandes einzusetzen.

ANHANG C

Hamming´s Prediktor-Korrektor Methode

Zur Lösung eines linearen Systems gewöhnlicher Differentialgleichungen erster Ordnung wurde bei vorgegebenen Anfangsbedingungen Hamming´s modifizierte Prediktor-Korrektor Methode verwendet (Ref 29). Sie stellt ein numerisch stabiles Integrationsverfahren vierter Ordnung dar. Da sie im Gegensatz zu anderen Methoden (z. B. Runge-Kutta) nicht "selbststartend" ist, wurde ihr zur Berechnung der Startwerte ein Runge-Kutta Verfahren vorgeschaltet. Die Vorteile von HPKM liegen in ihrer Schnelligkeit und in der Möglichkeit, bei jedem Schritt den lokalen Abschneidefehler zu bestimmen. Das versetzt das Programm in die Lage, ohne größeren Rechenzeitverlust, die Schrittweite h zu wählen und zu verändern.

Die gekoppelten Kanalgleichungen sind von der Gestalt:

$$y_1' = \frac{dy_1}{dx} = V_{11}(x)\,y_1 + V_{12}(x)\,y_2 + \ldots\ldots + V_{1n}(x)\,y_n$$

$$y_2' = \frac{dy_2}{dx} = V_{21}(x)\,y_1 + V_{22}(x)\,y_2 + \ldots\ldots + V_{2n}(x)\,y_n$$

C 1

. . . . . .

$$y_n' = \frac{dy_n}{dx} = V_{n1}(x)\,y_1 + V_{n2}(x)\,y_2 + \ldots\ldots + V_{nn}(x)\,y_n$$

und den Anfangsbedingungen

C 2 $\quad y_1(x_0) = y_{1,0}\ ,\ y_2(x_0) = y_{2,0}\ ,\ \ldots\ldots\ y_n(x_0) = y_{n,0}$

Einigen wir uns auf folgende Abkürzungen für die nachstehenden zwei Spaltenvektoren und die quadratische nxn Matrix V:

C 3 $$Y(x) = \begin{pmatrix} Y_1(x) \\ Y_2(x) \\ \vdots \\ Y_n(x) \end{pmatrix} ; \quad Y_0 = \begin{pmatrix} Y_{1,0} \\ Y_{2,0} \\ \vdots \\ Y_{n,0} \end{pmatrix} ; \quad V(x) = \begin{pmatrix} V_{11}(x) & V_{12}(x) & \cdots & V_{1n}(x) \\ V_{21}(x) & V_{22}(x) & \cdots & V_{2n}(x) \\ \vdots & & & \\ V_{n1}(x) & V_{n2}(x) & \cdots & V_{nn}(x) \end{pmatrix}$$

so erscheinen die gekoppelten DGLen in der folgenden Form:

C 4 $$Y' = \frac{dY}{dx} = V(x) \cdot Y \qquad mit \quad Y(x_0) = Y_0$$

Kennt man nun an vier äquidistanten Punkten x_{j-3}, x_{j-2}, x_{j-1} und x_j bereits das Ergebnis, so berechnet sich der entsprechende Wert für den Punkt $x_{j+1} = x_j + h$ - h ist die Schrittweite - nach den folgenden Formeln:

C 5 Prediktor: $$P_{j+1} = Y_{j-3} + \frac{4h}{3}\left(2Y'_j - Y'_{j-1} + 2Y'_{j-2}\right)$$

C 6 Modifikator: $$M_{j+1} = P_{j+1} - \frac{112}{121}\left(P_j - C_j\right)$$
$$M'_{j+1} = V(x_{j+1}) \cdot M_{j+1}$$

C 7 Korrektor: $$C_{j+1} = \frac{1}{8}\left(9Y_j - Y_{j-2} + 3h\left(M'_{j+1} + 2Y'_j - Y'_{j-1}\right)\right)$$

C 8 Endwert: $$Y_{j+1} = C_{j+1} + \frac{9}{121}\left(P_{j+1} - C_{j+1}\right)$$

Die Formeln C5 und C8 haben einen lokalen Abschneidefehler gemäß:

C 9 $$T_1 = \frac{14}{45} h^5 Y^{(5)}(\xi_1) \quad , \qquad \xi_1 \in (x_{j-3}, x_{j+1})$$

und

C 10 $$T_2 = -\frac{1}{40} h^5 Y^{(5)}(\xi_2), \quad \xi_2 \in (x_{j-2}, x_{j+1})$$

so daß sich ergibt:

C 11 $$C_{j+1} - P_{j+1} = \frac{121}{360} h^5 Y^{(5)}(\xi), \quad \xi \in (x_{j-3}, x_{j+1})$$

Nimmt man an, daß Y (x) im Intervall (x_{j-3} , x_{j+1}) keine starken Änderungen durchläuft, so erhält man:

C 12 $$T_2 \approx \frac{9}{121} (P_{j+1} - C_{j+1})$$

Diese Formel für T_2 offenbart die Tatsache, daß die Komponenten des Spaltenvektors ($P_{j+1} - C_{j+1}$) ein Maß sind für die Rundungsfehler in den Komponenten des berechneten Spaltenvektors Y_{j+1}. Dies ermöglicht eine Genauigkeitsüberprüfung und ein Anpassen der Schrittweite h während des Rechenvorganges selbst durch das Einführen einer Testgröße:

C 13 $$\delta = \sum_{i=1}^{n} a_i \left| P_{j+1,i} - C_{j+1,i} \right|$$

Die Entwicklungskoeffizienten a_i , i=1,2,3,...n sind Fehlergewichte, die zu Beginn des Programms spezifiziert werden müssen.

Wird die Testgröße δ während des Rechenprozesses größer als die vorgegebene geforderte Genauigkeit ε , so wird die Schrittweite halbiert und es wird der Wert für $Y_{j-\frac{1}{2}} = Y(x_j + \frac{h}{2})$ berechnet. Dies geschieht unter zu Grundelegung von

$Y(x_j - \frac{h}{2})$ und $Y(x_j - \frac{3h}{2})$ mit Hilfe der folgenden Interpolationsformel erster Ordnung.:

C 14 $$Y_{j-\frac{1}{2}} = \frac{1}{256}\left(80Y_j + 135Y_{j-1} + 40Y_{j-2} + Y_{j-3}\right) + \frac{h}{2}\,\frac{15}{128}\left(-Y'_j + 6Y'_{j-1} + Y'_{j-2}\right)$$

C 15 $$Y_{j-\frac{3}{2}} = \frac{1}{256}\left(12Y_j + 135Y_{j-1} + 108Y_{j-2} + Y_{j-3}\right) + \frac{h}{2}\,\frac{3}{128}\left(-Y'_j - 18Y'_{j-1} + 9Y'_{j-2}\right)$$

Unterschreitet δ den Wert $\varepsilon/50$, so wird die Schrittweite verdoppelt; jedoch ist dieser Schritt so ausgelegt, daß erstens die errechnete Schrittweite niemals größer wird als die vorgegebene Schrittweite h, und daß zweitens gewährleistet ist, daß mindestens für alle Punkte

(x_0+j*h), j=0,1,2,3... zwischen der oberen und unteren Integrationsgrenze, die Differentialgleichungen gelöst werden.

Eine Änderung der Schrittweite nach oben oder nach unten bedingt eine Änderung für $(P_{j+1} - C_{j+1})$ bzw für $(P_j - C_j)$:

C 16 $$Y_j = Y_{j-3} + \frac{3}{8}h\left(Y'_{j-3} + 3Y'_{j-2} + 3Y'_{j-1} + Y_j\right) - \frac{3}{80}h^5 Y^{(5)}(\xi_3)$$

mit

C 17 $$\xi_3 \in (x_{j-3}, x_j)$$

Nimmt man wiederum an, daß sich $Y^{(5)}(x)$ in diesem Intervall nicht wesentlich ändert, läßt sich für $(P_j - C_j)$ vereinfachend schreiben:

C 18 $$P_j - C_j \approx \frac{242}{27}(Y_j - Y_{j-3}) - \frac{121}{36} h (Y'_j + 3Y'_{j-1} + 3Y'_{j-2} + Y'_{j-3})$$

Beim Verdoppeln der Schrittweite wird daraus:

C 19 $$P_{j+1} - C_{j+1} \approx \frac{242}{27}(Y_{j+1} - Y_{j-5}) - \frac{121}{36} 2h \cdot (Y'_{j+1} + 3Y'_{j-1} + 3Y'_{j-3} + Y'_{j-5})$$

Analog ergibt sich bei Halbierung:

C 20 $$P_j - C_j \approx \frac{242}{27}(Y_j - Y_{j-\frac{3}{2}}) - \frac{121}{36} \cdot \frac{h}{2} \cdot (Y'_j + 3Y'_{j-3/2} + 3Y'_{j-1} + Y'_{j-\frac{3}{2}})$$

Die Startwerte für Y_1, Y'_1, Y_2, Y'_2, Y_3 und Y'_3 werden mit Hilfe eines Runge-Kutta Verfahrens bestimmt. Das vierte Wertepaar Y_0 und Y'_0 ist definiert durch die Anfangsbedingungen. Das Runge-Kutta Verfahren dient auch zur richtigen Dimensionierung der Schrittweite für die geforderte Genauigkeit. Beginnend am Punkte x_j wird das Ergebnis für den Punkt $x_{j+1} = x_j + h$ gemäß den folgenden Formeln berechnet:

C 21a $$K_1 = h \cdot Y'_j$$

C 21b $$K_2 = h\cdot\left(A(x_j + 0.4h)\cdot(Y_j + 0.4K_1) + F(x_j + 0.4h)\right)$$

C 21c $$K_3 = h\cdot\left(A(x_j + 0.45573725421878994 3\,h)\cdot(Y_j + 0.29697760924775360\,K_1 + 0.15875964497103583\,K_2) + F(x_j + 0.45573725421878994 3\,h)\right)$$

C 21d $$K_4 = h\cdot\left(A(x_j+h)\cdot(Y_j + 0.21810038822592047\,K_1 - 3.0509651486929308\,K_2 + 3.8328647604670103\,K_3) + F(x_j+h)\right)$$

C 21e $$Y_{j+1} = Y_j + 0.17476028226269037\,K_1 - 0.55148066287873294\,K_2 + 1.2055355993965235\,K_3 + 0.17118478121951903\,K_4$$

Die Spaltenvektoren Y_j, Y_{j+1}, Y'_j, K_i, i=1,4 sind n-komponentige Spaltenvektoren; V ist eine quadratische nxn Matrix. Die obigen Formeln weisen nur eine geringe numerische Stabilität auf. Da sie aber nur zu Beginn für drei aufeinanderfolgende Schritte angewendet werden, ist dies ohne Bedeutung. Auf der anderen Seite haben sie jedoch die geringsten Abschneidefehler aller Runge-Kutta Verfahren von 4. Ordnung. Sie sind daher bevorzugt anwendbar für alle nicht selbststartenden Integrationsprozeduren.

Zur Eingangskontrolle der Genauigkeit und zur Anpassung der erforderlichen Schrittweite h wird zu Anfang eine Näherung für $Y_2 = Y(x_0 + h) \equiv Y_2^{(1)}$ unter Verwendung von h und

anschließend eine weitere Näherung $Y_2^{(2)}$ mit zweimaliger Verwendung von h/2 berechnet. Daraus läßt sich auf folgende Art eine Testgröße δ für die Genauigkeit ableiten:

C 22 $$\delta = \frac{1}{15} \sum_{i=1}^{n} a_i \left| Y_{2,i}^{(1)} - Y_{2,i}^{(2)} \right|$$

Wird δ größer als die geforderte Genauigkeit ε, so wird die Schrittweite h halbiert und das Verfahren beginnt erneut am Punkte x_0.

Wird δ kleiner als ε, so wird $Y_1^{(2)} = Y(x_0 + h/2)$ und $Y_2^{(2)} = Y(x_0 + h)$ als richtig angenommen. Im dritten Schritt schließlich wird die Lösung für $x = x_0 + 3/h$ berechnet

($Y_3 = Y(x_0 + 3/2*h)$).

Die in diesen drei Schritten verwendete Schrittweite wird halbiert und als Anfangsschrittweite im Prediktor-Korrektor Verfahren verwendet.

Es ist überaus wichtig, daß die Anfangswerte so genau wie möglich bekannt sind, da sich eine etwaige Ungenauigkeit im Prediktor-Korrektor Verfahren vergrößern kann. Sie werden deshalb nochmals mit einem Interpolationsverfahren vierter Ordnung verfeinert:

C 23a $$Y_1 = Y_0 + \frac{h}{24}(9Y_0' + 19Y_1' - 5Y_2' + Y_3')$$

C 23b $$Y_2 = Y_0 + \frac{h}{3}(Y_0' + 4Y_1' + Y_2')$$

C 23c $$Y_3 = Y_0 + \frac{3h}{8}(Y_0' + 3Y_1' + 3Y_2' + Y_3')$$

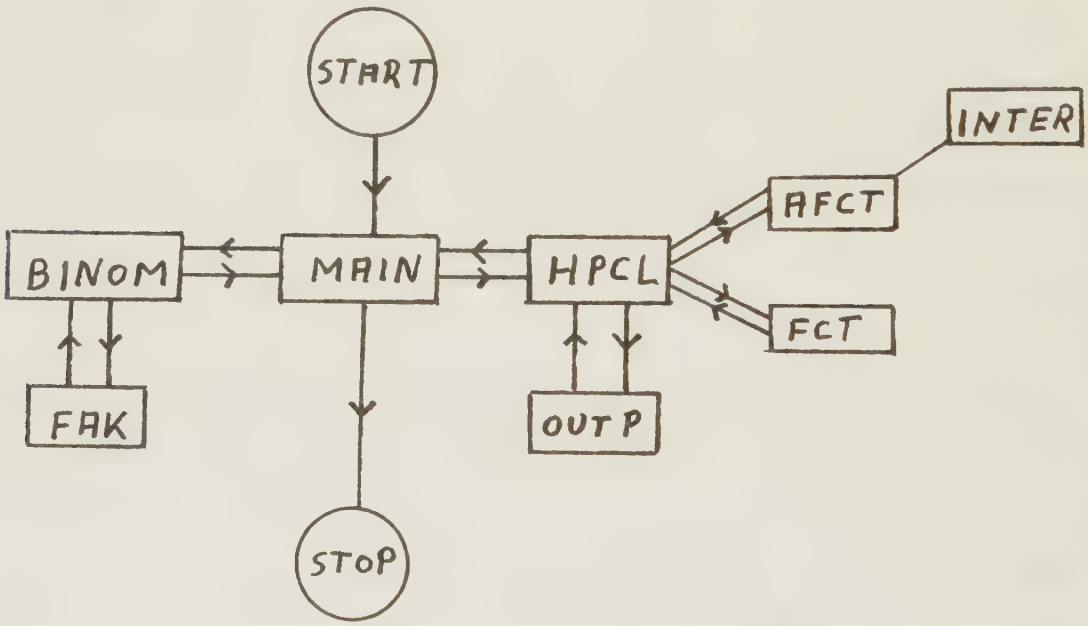
Es läßt sich zeigen, daß mit Hilfe dieser Methode der Spaltenvektor(P_3 - C_3) im Modifikator für j=3 verschwindet.

Für weitergehende Literatur siehe Ref 30 und 31.

ANHANG D

Programmaufbau und Erläuterung

Die Programmstruktur des verwendeten Computer-Codes zur Lösung der gekoppelten Kanalgleichungen wird am besten an Hand des folgenden Flußdiagrammes ersichtlich:



Erläuterungen:

MAIN (Hauptprogramm)

1. Bestimmung der verschiedenen Konfigurationen aus der Anzahl der Zustände und der Elektronenanzahl.

2. Einlesen der Stoßcharakteristiken (E lab, Z, b etc)

3. Bestimmung der Stoßkonstanten und -parameter (R min, ε , v_∞ etc)

4. Einlesen der Stützpunkte für Energien und Marixelemente.

5. Aufruf von HPCL.

BINOM, FAK

Diese Unterprogramme berechnen Binomialkoeffizienten und Fakultäten zur Bestimmung der Konfigurationsanzahl.

HPCL

Lösungsprogramm für die gekoppelten Kanalgleichungen

$$Y'(x) = V(x) * Y(x) + F(x)$$

Methode: Hamming's Prediktor-Korrektor Verfahren. Vorgeschaltet zur Bestimmung der Startwerte ist ein Runge-Kutta Verfahren.

AFCT

Unterprogramm zur Bestimmung der Kopplungsmatrix V

FCT

Unterprogramm zur Bestimmung von F(x)

(In unserem Falle ist F(x)=0)

INTER

Interpolationsprogramm für Energien und Matrixelemente in AFCT

OUTP

Ausgaberoutine für Wahrscheinlichkeitsamplituden, ihren Ableitungen und Kernabstand.

Nach der Rückkehr von HPCL zu MAIN besteht die Möglichkeit, automatisch einen zweiten Stoß, basierend auf dem ersten, zu berechnen.

LITERATURVERZEICHNIS

Ref 1 P. Mokler, H.J. Stein, P. Armbruster; Phys. Rev. Lett., 29 (1972) 827

Ref 2 J.R. MacDonald, M. D. Brown, T. Chiao; Phys. Rev. Lett., 30 (1973) 471

Ref 3 F. W. Saris, W. F. van der Weg, H. Tawara, R. Laubert, Phys. Rev. Lett., 28 (1972) 717

Ref 4 W. Meyerhof, T. K. Saylor, S. M. Lazarus, W. A. Little, B. B. Triplett, L. F. Chasw, Phys. Rev. Lett., 30 (1973) 1279

Ref 5 C. K. Davis, J. S. Greenberg, Phys. Rev. Lett. 32 (1974) 1215

Ref 6 P. Gippner, K.-H. Kaun, F. Stary, W. Schulze, Yu. P. Tretyakov, Nucl. Phys. A 230 (1974) 509

Ref 7 K. O. Groeneveld, B. Knaf, G. Presser, Proc. Int. Conf. on Reactions between Complex Nucleii, Nashville, Tenn., June 1974 , Vol 1, p. 133 North Holland Publ. Comp., Amsterdam

K. O. Groeneveld, B. Kolb, Inst. für Kernphysik Frankfurt , Jahresbericht (1974) p. 86

Ref 8 W. Wölfli, Ch. Stoller, G. Bonani, H. Suter, M. Stöckli, Lettere al Nuovo Cimento, 14 (1975) 577

Ref 9 H. Schmidt-Böcking, I. Tserruya, R. Schule, G. Gaukler, K. Bethge, Inst. für Kernphysik Frankfurt,

Jahresbericht (1974) ; R. Schule, H. Schmidt-Böcking, I. Tserruya, G. Gaukler, K. Bethge, Electronic and Atomic Collisions, Abstracts of papers of the IX th International Conference on the Physics of Electronic and Atomic Collisions, Edited by J. S. Risley, G. Geballe, Vol I, Seattle, July 1975, University of Washington Press

Ref 10 R. K. Smith, B. Müller, W. Greiner, Dynamical Theory of Intermediate Molecular Phenomena in Heavy Ion Scattering, J. Phys. B: Atom. Molec. Phys., Vol 8 Nr. 1 1975

Ref 11 G. Heiligenthal, Diplomarbeit, 1974, Inst. für theoret. Physik, Universität Frankfurt/M

Ref 12 J. Kirsch, Diplomarbeit, 1976, Inst. f. theoret. Physik, Universität Frankfurt/M

Ref 13 W. Betz, G. Soff, B. Müller, W. Greiner, Direct Formation of Quasi-Molecular 1 s Vacancies in Uranium-Uranium Collisons, Institut für theoret. Physik, Universität Frankfurt/M

Ref 14 Die Idee der superschweren Quasimoleküle wurde seit 1969 in verschiedenen GSI-Seminaren diskutiert und zuerst von J. Rafelski, L. Fulcher und W. Greiner in Phys. Rev. Lett. 27 (1971) 958 veröffentlicht.

Ref 15 J. Rafelski, B. Müller, W. Greiner, 1972, Lett. Nuovo Cim. 4, 469

Ref 16 G. Soff, W. Betz, G. Heiligenthal, J. Kirsch, B. Müller, J. Reinhardt, W. Greiner, What can one learn about superheavy atoms from heavy ion collisions, Fizika 9 (1977) Suppl. 4, 721-764

Ref 17 G. Soff, B. Müller, W. Greiner, On the spectroscopy of electronic states in superheavy quasimolecules, Phys. Rev. Lett.

Ref 18 W. Pieper, W. Greiner, Zeitschrift f. Physik, 218 (1969) 327;

B. Müller, H. Peitz, J. Rafelski, W. Greiner, Phys. Rev. Lett. 28 (1972) 1235

R. K. Smith, H. Peitz, B. Müller, W. Greiner, Phys. Rev. Lett. 32 (1974) 554

Ref 19 Ya. B. Zeldovich, V. S. Popov, Usp. Fiz. Nauk., 105 (1971) 403-40 (Sov. Phys. Usp 14 (1972) 673)

Ref 20 B. Müller, W. Greiner, The physics of strong fields in quantum-electrodynamics and general relativity, Inst. f. theoret. Physik, Universität Frankfurt/M; Invited Lectures given XVI. Internat. Kernphysikwoche 1977, Schladming, Austria; Acta Physica, Austriaca Suppl. XVIII, 153 - 384 (1977)

Ref 21 B. Müller, J. Rafelski, W. Greiner, Phys. Lett. 47 B (1973) 5;

B. Müller, W. Greiner, Z. Naturforschung 31 a (1976) 1

Ref 22 L. I. Schiff, Quantum Mechanics, Tokio, 1955

Ref 23 B. Müller, J. Rafelski, W. Greiner, Z. Physik 257 a (1972) 62

Ref 24 W. Betz, G. Soff, B. Müller, W. Greiner,Phys. Rev. Lett. 37 (1976) 1046

Ref 25 W. Betz, G. Heiligenthal, B. Müller, V. Oberacker, J. Reinhardt, W. Schäfer, G. Soff, W. Greiner, Inst. f. theoret. Physik, Universität Frankfurt/M, Atomic Physic with Superheavy Quasi-Molecules

Ref 26 W. Betz, Diplomarbeit, Inst. f. theoret. Physik, Universität Frankfurt/M

Ref 27 P. T. Greenland, private Mitteilung, Inst. f. theoret. Physik, Universität Frankfurt/M

Ref 28 D. R. Bates, R. Mc Carroll, Proc. Roy. Soc., A 245 (1958) 175

Ref 29 IBM Manual, System/360 Scientific Subroutine Package

Ref 30 A. Ralston/H. S. Wilf, Mathematical Methods for Digital Computers, Wiley, New York/London 1960 pp. 95-109

Ref 31 A. Ralston, "Runge-Kutta Methods with Minimum Error Bounds", MTAL, Vol 16, Nr. 80 (1962), pp. 431 - 437

Ref 32 J. Reinhardt, W. Greiner, Überschwere Quasimoleküle, Physik in unserer Zeit 7. Jahrgang1976//Heft 6

Ref 33 U. Fano, W. Lichten, Phys. Rev. Lett., 14 627 (1965)

Ref 34 B. Müller, Dissertation, Inst. f. theoret. Physik, Universität Frankfurt/M 1973

Ref 35 W. E. Meyerhof, Phys. Rev. A 10 (1974) 1005

Ref 36 C. Foster, T. Hoog Kamer, P. Wörles, F. W. Saris, Evidence for Direct Coulomb K-shell Vacancy Production in

Heavy Ion-Atom Collisions, J. Phys. B 1975

Ref 37 D. Birch, W. P. Ingalls, H. Wieman, R. Vandenbosch, Phys. Rev. A 10 (1974) 1245

Ref 38 H. Peitz, Dissertation, Inst. f. theoret. Physik, Universität Frankfurt/M, 1978

Ref 39 J. Reinhardt, private Mitteilung, 1978

Ref 40 J. Greenbeerg, H. Bokemeyer, H. Emling, E. Grosse, D. Schwalm, F. Bosch, Impact parameter dependence of vacancy production in strongly bound quasi-molecular states of heavy collision systems, preprint

Ref 41 J. R. MacDonald, P. Armbruster, H. Behncke, F. Folkmann, S. Hagmann, D. Liesen, P. Mokler, A. Warczak, An absolute measurement of the probability for 1 s and 2 p 1/2 excitation of the lead K-shell, zu veröffentlichen in Z. Physik A (1977)

Ref 42 G. Heiligenthal, W. Betz, G. Soff, B. Müller, W. Greiner, The Influence of Rotational Coupling on K-Vacancy Formation in U-Pb Collisions, Z. Physik, A 285 (1978) 105

FIGURENBESCHREIBUNG

Fig 1 Definition der Schwerpunktskoordinate $\vec{R}_{cm}$ und der Relativkoordinate $\vec{R}_1 + \vec{R}_2$ beim Zweiteilchenproblem.

Fig 2 gekoppelte Kanalrechnung (1 sσ, 2 sσ, 3 sσ, 4 sσ)

Die totale K-Lochwahrscheinlichkeit wurde für das 1-, 2- und 3-Elektronenproblem aufgetragen. Anfänglich waren besetzt das 1 sσ, das 1 sσ und 2 sσ und das 1 sσ, 2 sσ und das 3 sσ Niveau. Die gestrichelte Kurve zeigt die Ergebnisse der Störungsrechnung für die Anregung des 1 s Elektrons ins Kontinuumm.

Fig 3 U-U System, Stoßparameter b=0; aufgetragen wurde die asymptotische Endwahrscheinlichkeit als Funktion von E lab. Berücksichtigt wurden 4 s Zustände, die nacheinander mit 1, 2 und 3 Elektronen bevölkert wurden. Die gestrichelte Kurve zeigt die Emissionswahrscheinlichkeit des 1 s Elektrons ins Kontinuum in der Störungstheorie.

Fig 4 U-U System, E lab=1100 MeV; aufgetragen wurde die asymptotische Endwahrscheinlichkeit als Funktion des Stoßparameters. Berücksichtigt wurden 4 s Zustände, die nacheinander mit 1, 2 und 3 Elektronen bevölkert wurden. Die gestrichelte Kurve zeigt die Emissionswahrscheinlichkeit des 1 s Elektrons in der Störungsrechnung.

Fig 5 U-U System, E lab = 1100 MeV; aufgetragen wurde die asymptotische Endwahrscheinlichkeit als Funktion des Stoßparameters. Geplottet wurde die

asymptotische K- und L-Loch Wahrscheinlichkeit für die Anfangskonfigurationen: 1 s, 2 s besetzt; 1 s, 3 s besetzt; 1 s, 4 s besetzt. Die restlichen Schalen wurden zu Beginn des Stoßes als leer angenommen.

Alle weiteren Figuren sind Ergebnisse der gekoppelten Kanalrechnungen.

Fig 6 U-U System bei Stoßparameter b=0. Die Einschußenergie beträgt 1100 MeV entsprechend 4.6 MeV/Nukleon. Berücksichtigt wurden alle s Zustände bis 5 s σ . Die Anfangspopulationen stehen am rechten oberen Rand. Aufgetragen ist jeweils die gesamte K-Loch Wahrscheinlichkeit in Prozent.

Fig 7 U-U System; Bedingungen siehe Fig 6. Wieder wurde die gesamte K-Loch Wahrscheinlichkeit aufgetragen, jedoch diesmal als Funktion der mitgenommenen Zustände (siehe Konfigurationsbeschreibung rechts oben).

Fig 8 U-U System; Stoßparameter b=0. Diese Figur entspricht Fig 6. Es wurden lediglich die Mehrelektronenprobleme in einem vergrößerten Maßstab gezeichnet.

Fig 9 U-U System; Stoßparameter b=0. Ausgangskonfiguration sind die 5 s Zustände, von denen die untersten drei besetzt sind. Aufgetragen wurde die Abhängigkeit der K-Loch Wahrscheinlichkeit von der Einschußenergie. Verwendet wurden:

1500 MeV = 6.3 MeV/Nukl 1300 MeV = 5.5 MeV/Nukl

1100 MeV = 4.6 MeV/Nukl 900 MeV = 3.8 MeV/Nukl

Fig 10 U-U System; E lab = 1100 MeV. Ausgangskonfiguration siehe Fig 9. Aufgetragen wurde die Stoßparameterabhängigkeit der K-Loch Wahrscheinlichkeit (b = 0, 10, 20, 35 und 50 fm).

Fig 11 Pb-Pb System bei Stoßparameter b=0. Die Einschußenergie beträgt 936 MeV = 4.5 MeV/Nukleon. Sonst siehe Fig 6

Fig 12 Pb-Pb System; E lab = 936 MeV; Stoßparameter b=0. Aufgetragen ist das Konvergenzverhalten der K-Loch Wahrscheinlichkeit in Abhängigkeit der mitgenommenen Zustände (siehe Fig 7).

Fig 13 Pb-Pb System, Stoßparameter b=0; aufgetragen wurden die Wahrscheinlichkeitsamplituden als Funktion der Einschußenergie E lab. Anfangskonfiguration waren die fünf untersten s-Zustände, von denen das 1 s, 2 s und 3 s Niveau besetzt waren.

Fig 14 Pb-Pb System; E lab = 936 MeV. Es werden 5 Zustände berücksichtigt. Anfänglich ist 1 s σ bis 3 s σ besetzt. Es wird die Stoßparameterabhängigkeit der K-Loch Ionisation gezeigt (b = 0, 10, 20, 50 fm; siehe auch Fig 10).

Fig 15 U-U System; Stoßparameter b=0. Geplottet wurde die asymptotische K-Loch Wahrscheinlichkeit in Prozent als Funktion der Einschußenergie E lab.

Fig 16 U-U System; Einschußenergie = 1100 MeV. Aufgetragen ist die asymptotische K-Loch Wahrscheinlichkeit in Abhängigkeit des Stoßparameters b. Berücksichtigt wurden drei verschiedene Konfigurationen bei einer Basis von 5 Zuständen. Die einzelnen Kurven entsprechen der Besetzung der 5 Zustände mit jeweils 4, 3 und 2 Elektronen.

Fig 17 Pb-Pb System; Stoßparameter b=0. Beschreibung vergleiche mit Fig 15

Fig 18 Pb-Pb System; Einschußenergie 936 MeV. Beschreibung analog zu Fig 16.

Fig 19a U-U System; E lab = 1600 MeV, b=0. K-, L-, M- und N-Loch Wahrscheinlichkeit für ein Elektron bei vier Zuständen. Die oberste Kurve stellt die Wahrscheinlichkeit dar, daß sich die anfängliche Konfiguration (1 s σ besetzt, der Rest leer) überhaupt ändert.

Fig 19b U-U System; Einzelstoß; E lab = 1600 MeV; b=0. Anfänglich sind von vier Zuständen das 1 s σ und 2 s σ Niveau besetzt. Geplottet wurden die Wahrscheinlichkeiten der Konfigurationen, bei denen eine Ionisation der K-Schale stattgefunden hat und die gesamte K-Loch Wahrscheinlichkeit, die sich als Summe der Einzelkonfigurationswahrscheinlichkeiten zusammensetzt.

Fig 19c U-U System; Doppelstoßprozeß; Stoßparameter b=0; Einschußenergie 1600 Mev = 4.6 MeV/Nukleon. Berücksichtigt wurden vier Zustände, die anfänglich den 1 s σ und 2 s σ Zustand besetzt hatten. Im ersten Stoß (siehe Fig 19b) betrug die maximal mögliche K-Loch Wahrscheinlichkeit rund 10

Prozent. Dies wurde bei etwa 100 fm erreicht. Die anderen Konfigurationen wurden entsprechend ihrer Amplituden bei 100 fm angenommen. Fig 19c stellt also eine obere Grenze für die K-Loch Wahrscheinlichkeit im Doppelstoß dar. Aufgetragen wurde die auf 1 normierte totale K-Loch Wahrscheinlichkeit beim zweiten Stoß, sowie die der einzelnen Konfigurationen, bei denen die K-Schale ionisiert wird. Die asymmetrische Struktur der Konfigurationen 5 und 6 zeigt deutlich den Einfluß der Wechselwirkungen der einzelnen Konfigurationen untereinander.

Fig 20a U-U System; aufgetragen wurde die asymptotische Wahrscheinlichkeit P_∞ als Funktion des Stoßparameters bei drei verschiedenen Konfigurationen.

Fig 20b U-U System; aufgetragen wurde das Produkt P_∞ *b als Funktion des Stoßparameters b. Die drei Konfigurationen entsprechen denen in Fig 20a. Die Funktionen peaken bei zirka 20 fm und fallen dann exponentiell ab. Die Fläche unter den einzelnen Kurven ist ein Maß für den Wirkungsquerschnitt.

Fig 21a Pb-Pb System; Beschreibung siehe Fig 20 a.

Fig 21b Pb-Pb System; Beschreibung analog zu Fig 20b.

Fig 22 U-U System; E lab = 1600 MeV; Stoßparameter b=0. Aufgetragen wurde die Wahrscheinlichkeit, daß ein 1 s Elektron ins Kontinuum angeregt wird. Es wurde ein repräsentativer Kontinuumswert von 1.4 Elektronenmassen angenommen und mit einer Breite von 1 MeV gefaltet.

Bei Kurve 1 wurden beide Spinrichtungen berücksichtigt. Kurve 2 stimmt im wesentlichen mit den Ergebnissen der Störungsrechnung überein.

Fig 23 U-U System; E lab = 1600 MeV, b=0. Aufgetragen wurde die gesamte K- und L-Loch Wahrscheinlichkeit für die Emission eines Elektrons ins Kontinuum (siehe auch Fig 22). Berücksichtigt wurden dabei vier Zustände, die untereinander und mit dem Kontinuum wechselwirkten.

Fig 24 Anzahl der Löcher im 2 p 1/2 σ Niveau als Funktion des Stoßparameters. Die experimentellen Daten für den U-Pb Stoß stammen aus Ref 40. Die gestrichelten Linien zeigen die Stoßparameterabhängigkeit für die direkte 2 p 1/2 σ Ionisation in Pb-Pb und U-U Stößen bei E lab = 4.7 MeV/Nukleon. Die gekoppelten Kanalrechnung ergibt die gestrich-punktete Linie. Anfänglich wurde der 2 p 3/2 π Zustand als leer angenommen. Die durchgezogene Linie verdeutlicht die totale theoretische Vorhersage für die Ionisation.

Fig 25 U-U System, Elab = 1100 MeV; gezeichnet wurden die Wahrscheinlichkeitsamplituden der Rotationskopplung als Funktion des Stoßparameters b (b entspricht den Indexzahlen an den einzelnen Kurven). Berücksichtigt wurden die Zustände

2 p 1/2$\pm\sigma$, 2 p 3/2$\pm\sigma$ und 2 p 3/2$\pm\pi$. Die Zustände 2 p 3/2$\pm\pi$ wurden als anfänglich leer agenommen.

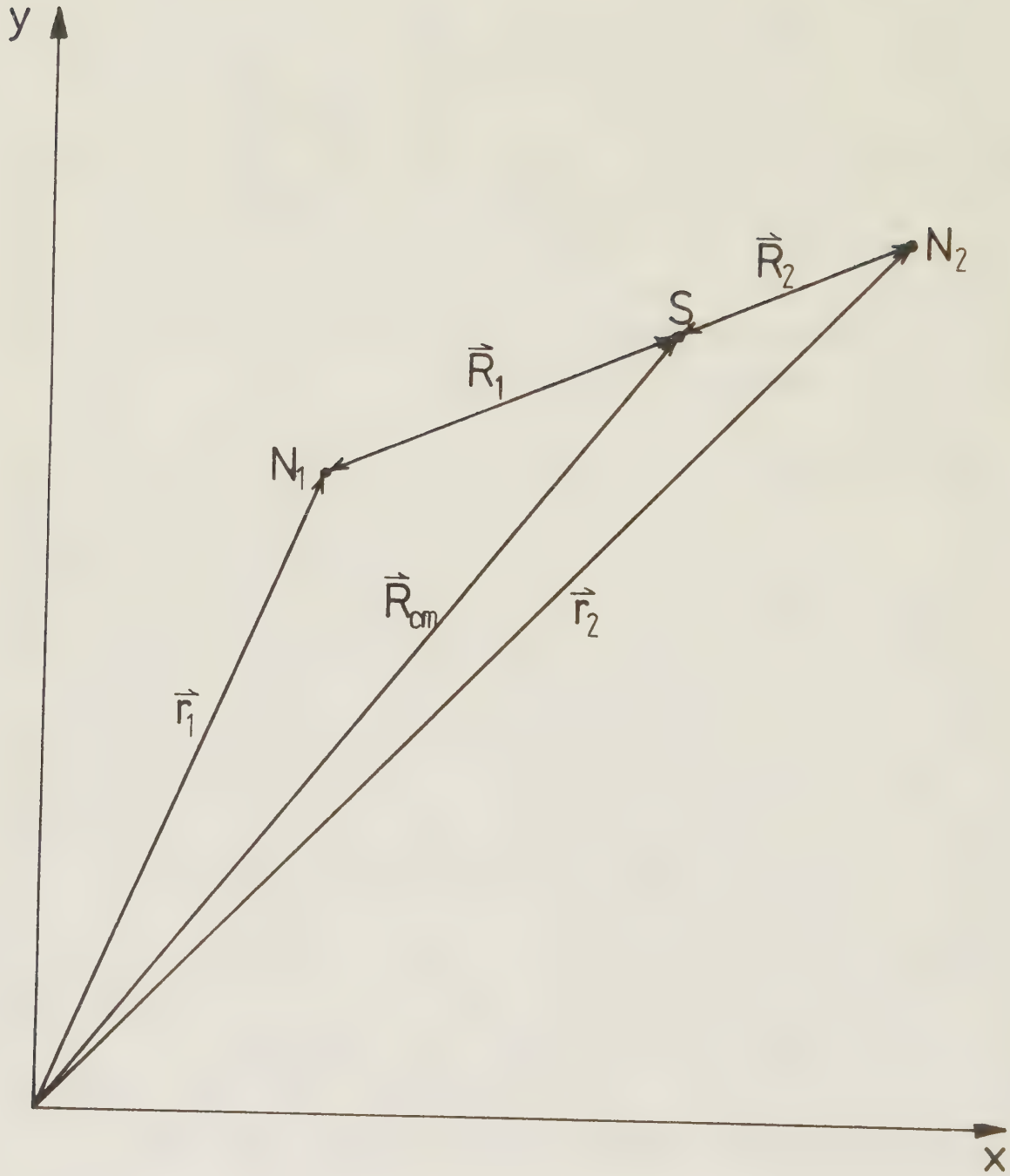


Fig.1

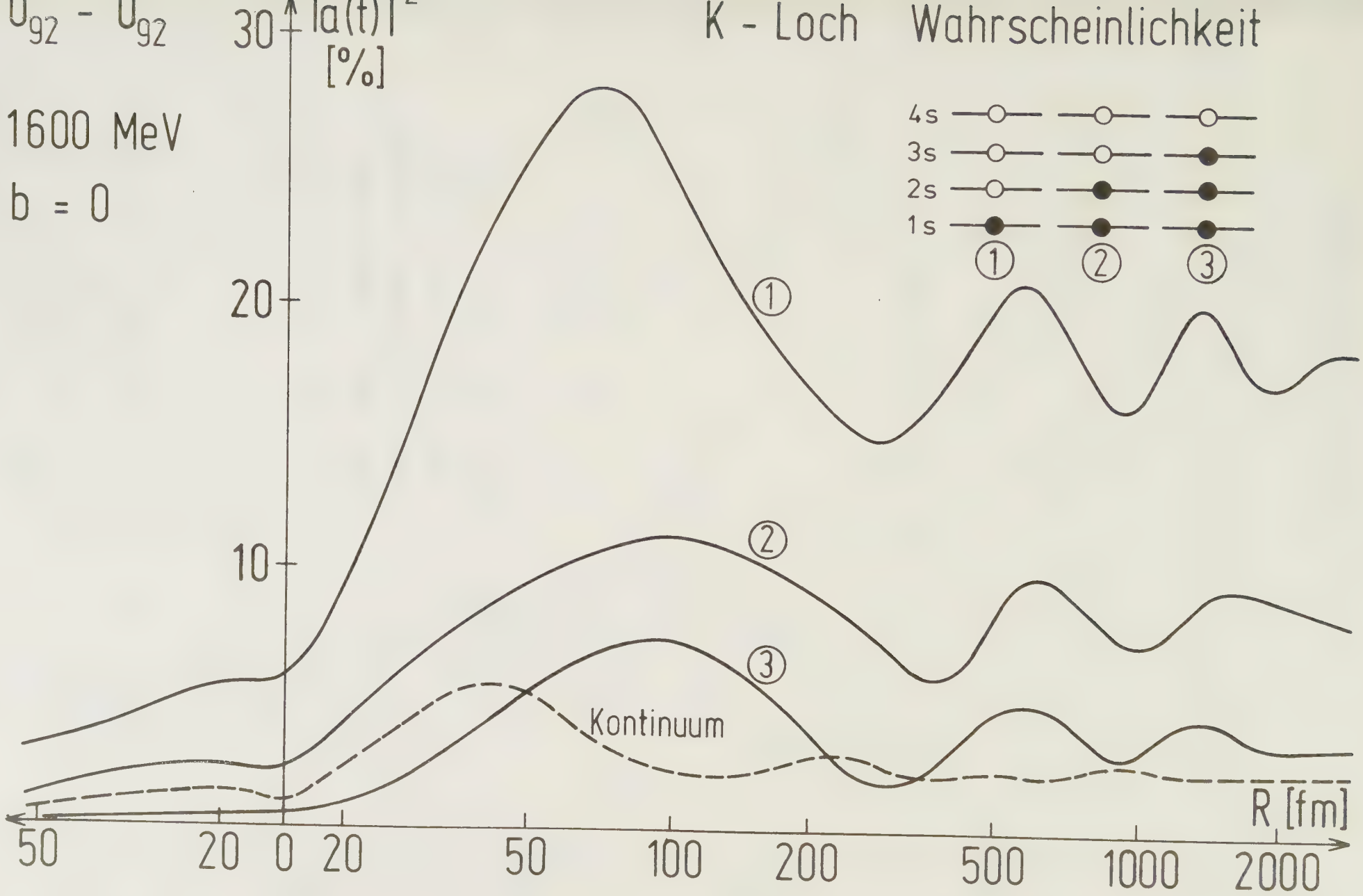

$U_{92} - U_{92}$
1600 MeV
b = 0
$|a(t)|^2$ [%]
K - Loch Wahrscheinlichkeit
4s
3s
2s
1s
1
2
3
Kontinuum
R [fm]
30
20
10
50
20
0
20
50
100
200
500
1000
2000

Fig. 2

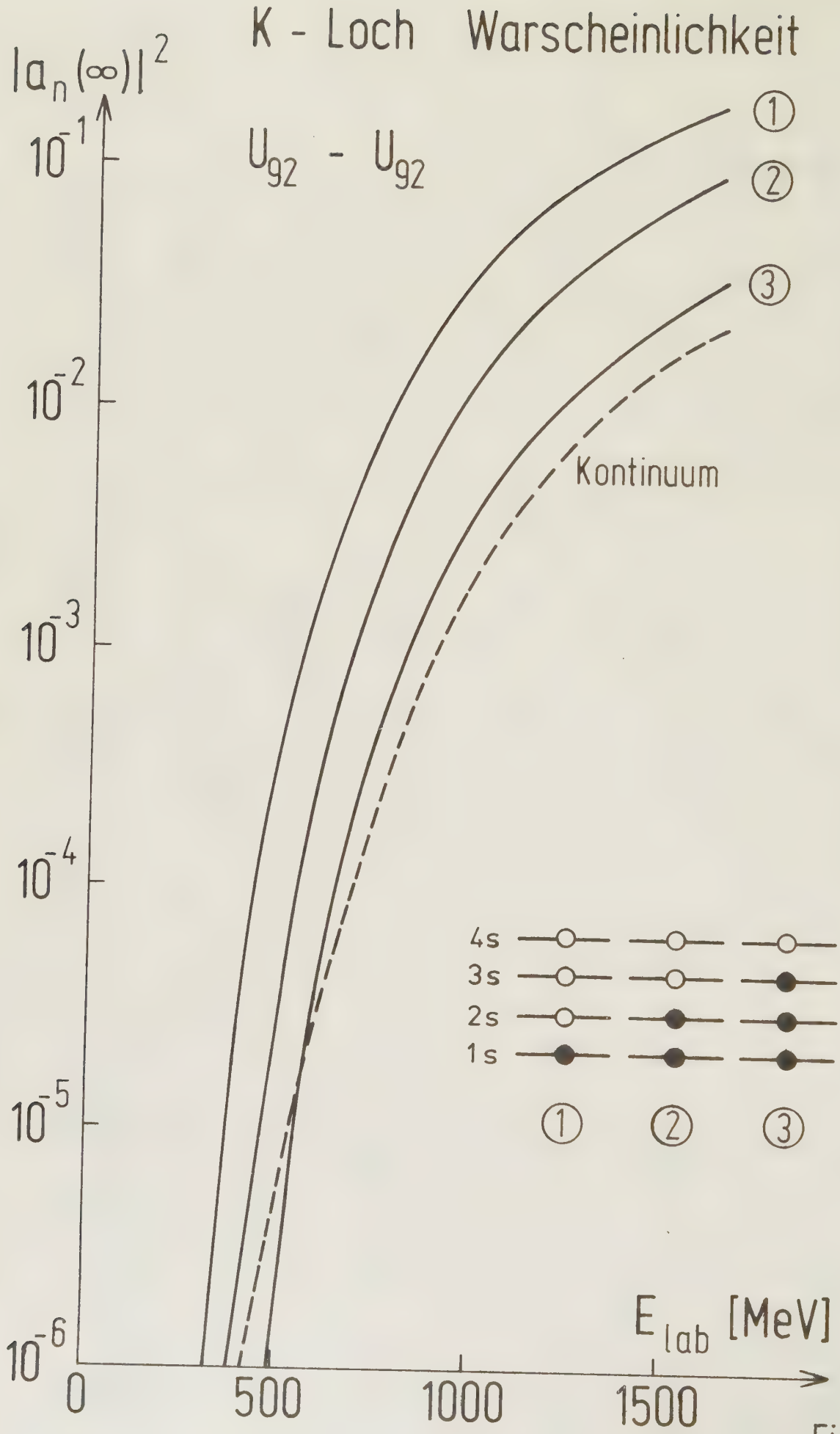

K - Loch Warscheinlichkeit
$|a_n(\infty)|^2$
U_{92} - U_{92}
10^{-1}
10^{-2}
10^{-3}
10^{-4}
10^{-5}
10^{-6}
①
②
③
Kontinuum
4s
3s
2s
1s
①
②
③
E_{lab} [MeV]
0
500
1000
1500

Fig.3

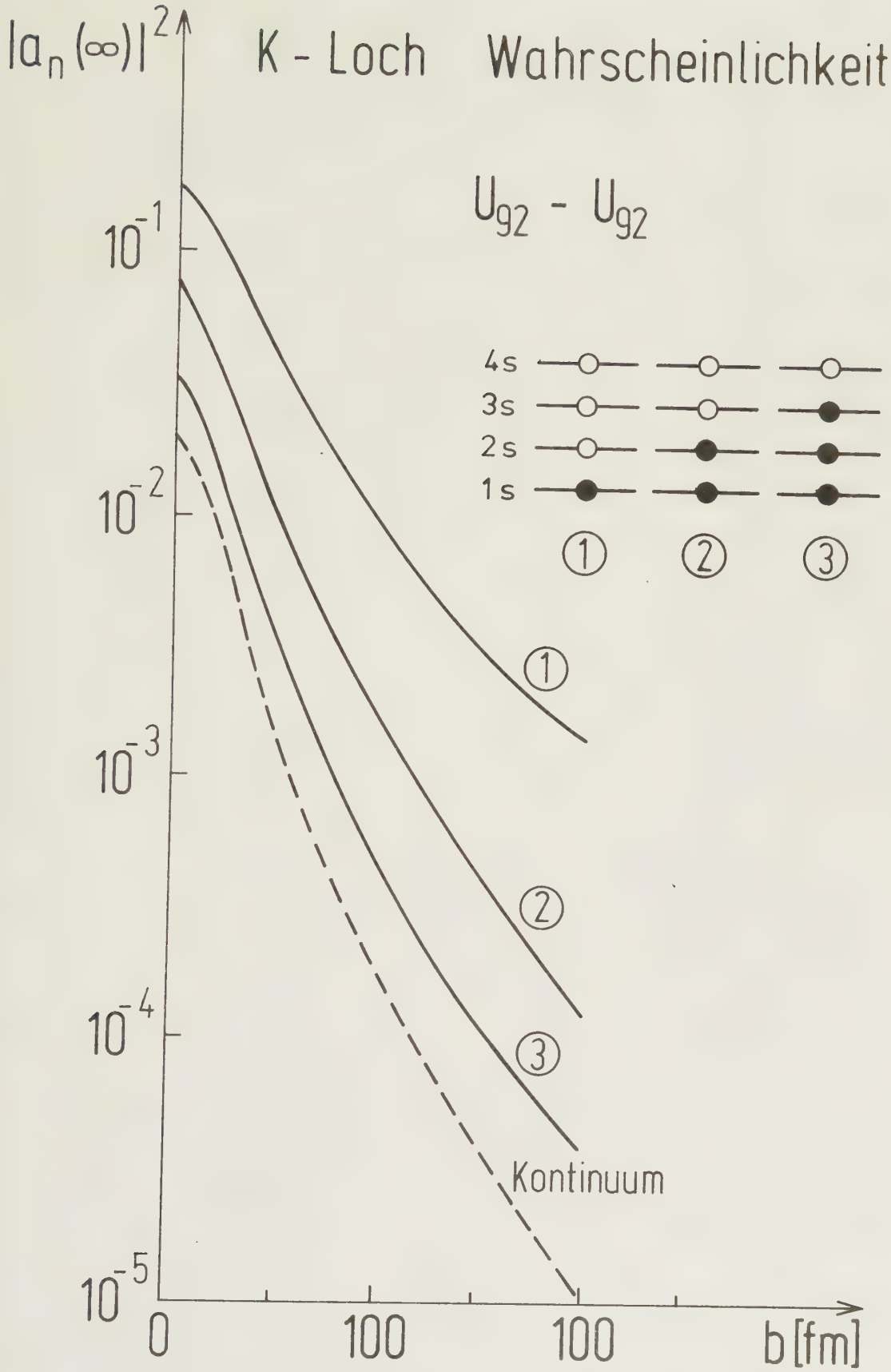

$|a_n(\infty)|^2$
K - Loch Wahrscheinlichkeit
$U_{92} - U_{92}$
4s
3s
2s
1s
①
②
③
10^{-1}
10^{-2}
10^{-3}
10^{-4}
10^{-5}
Kontinuum
0
100
100
b [fm]

Fig. 4

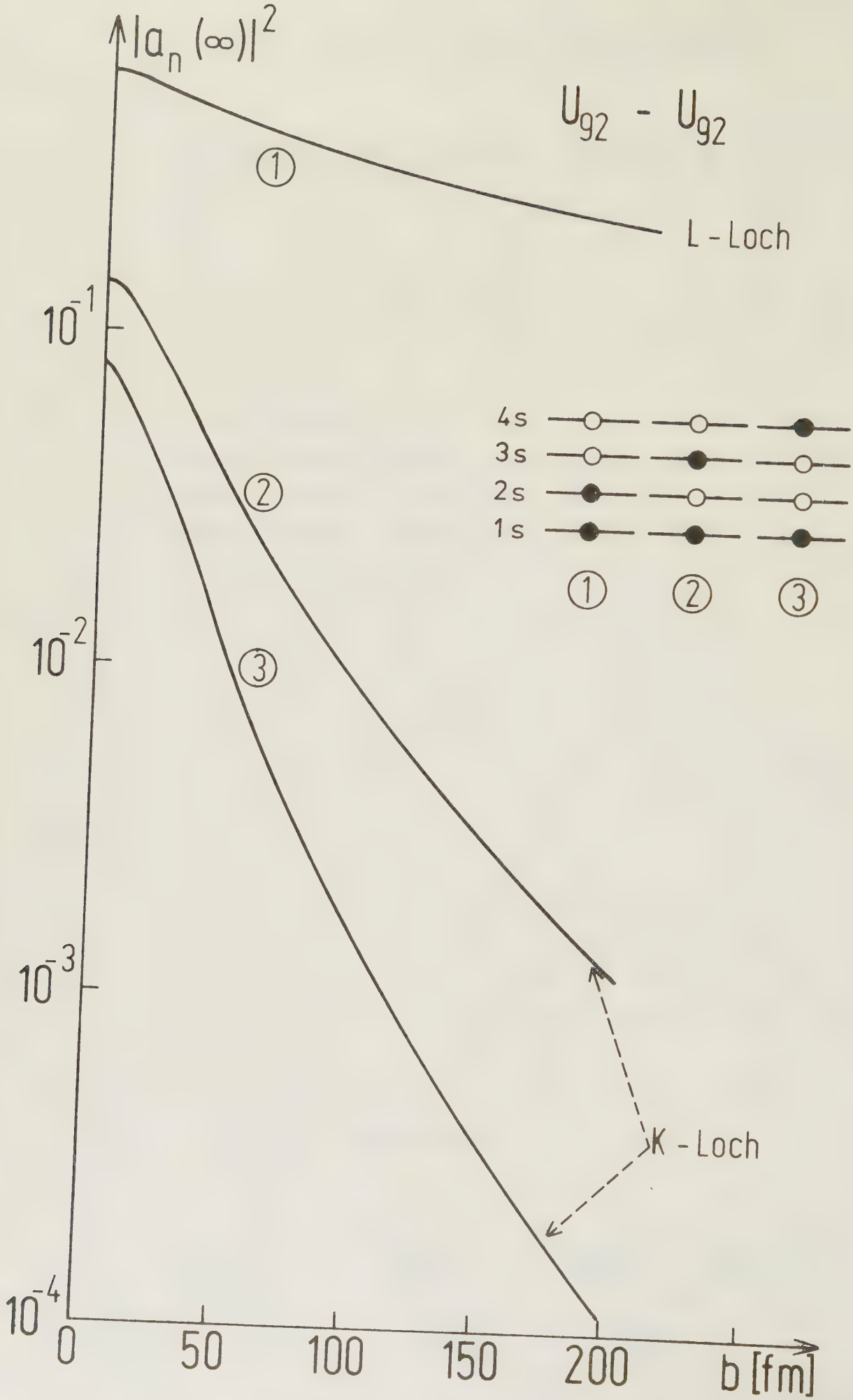

$|a_n(\infty)|^2$
U_{92} - U_{92}
①
L - Loch
10^{-1}
4s
3s
2s
1s
①
②
③
②
③
10^{-2}
10^{-3}
K - Loch
10^{-4}
0
50
100
150
200
b [fm]

Fig.5

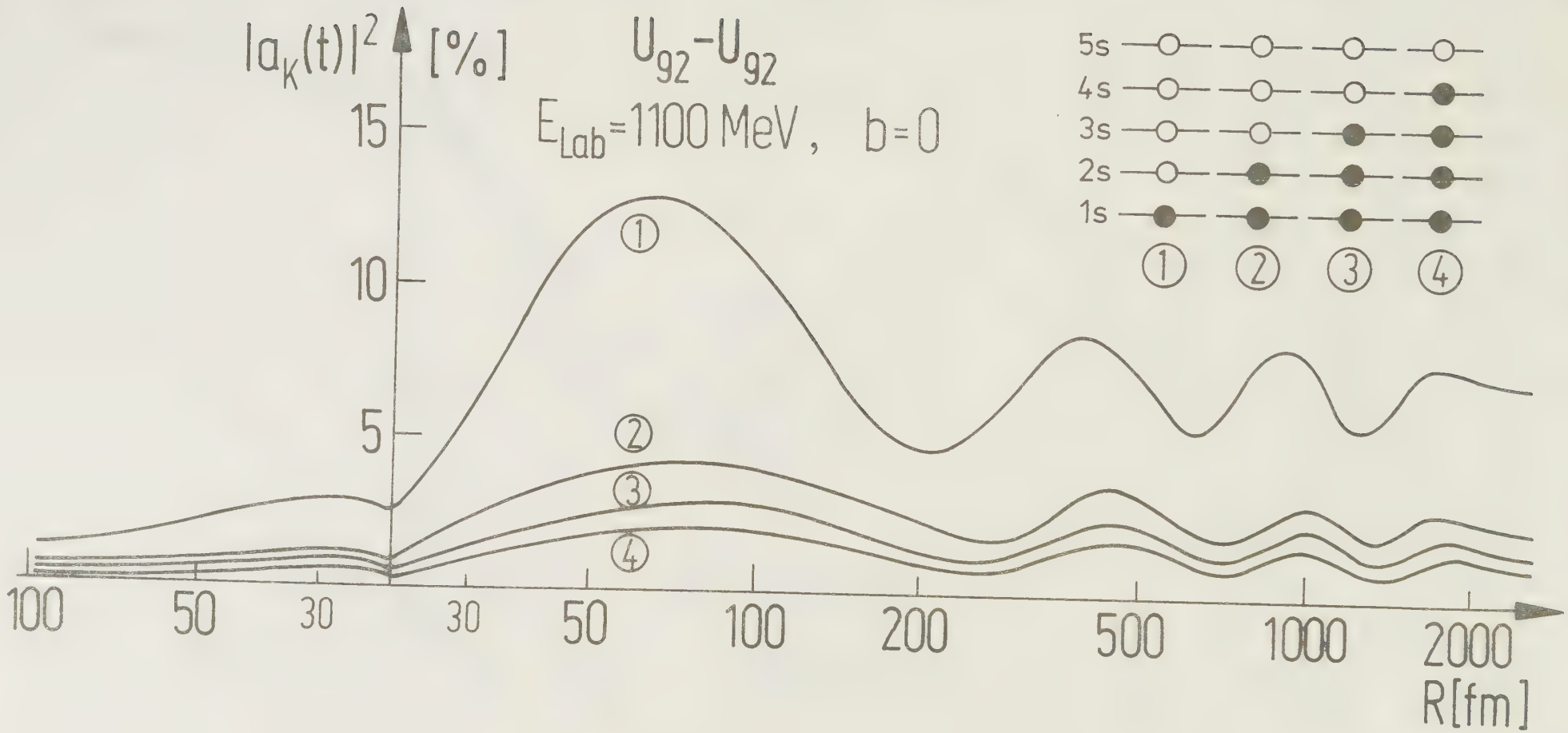

$|a_K(t)|^2$ [%]
$U_{92}-U_{92}$
E_{Lab}=1100 MeV, b=0
15
10
5
5s
4s
3s
2s
1s
1
2
3
4
100
50
30
30
50
100
200
500
1000
2000
R[fm]

Fig.6

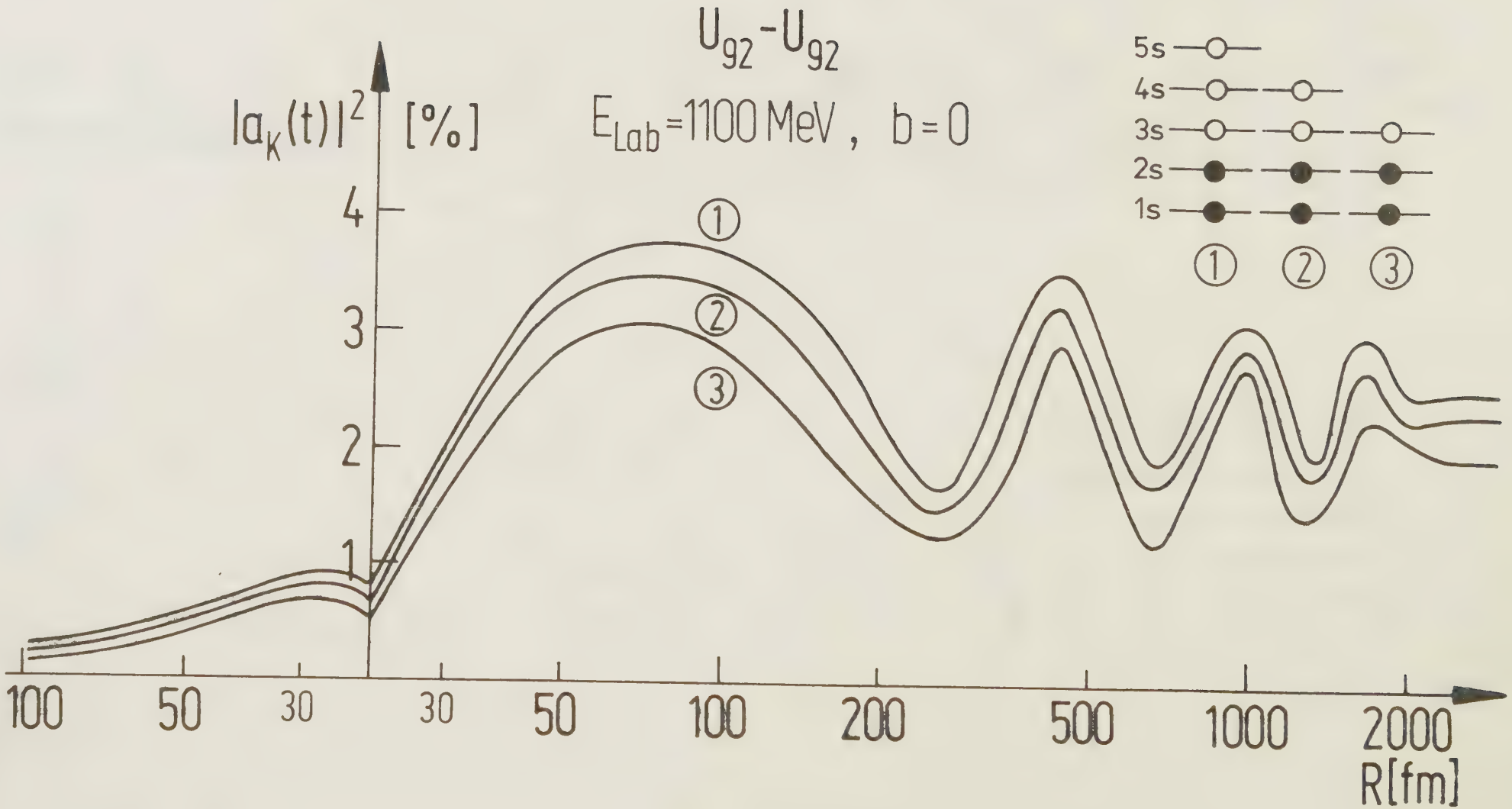
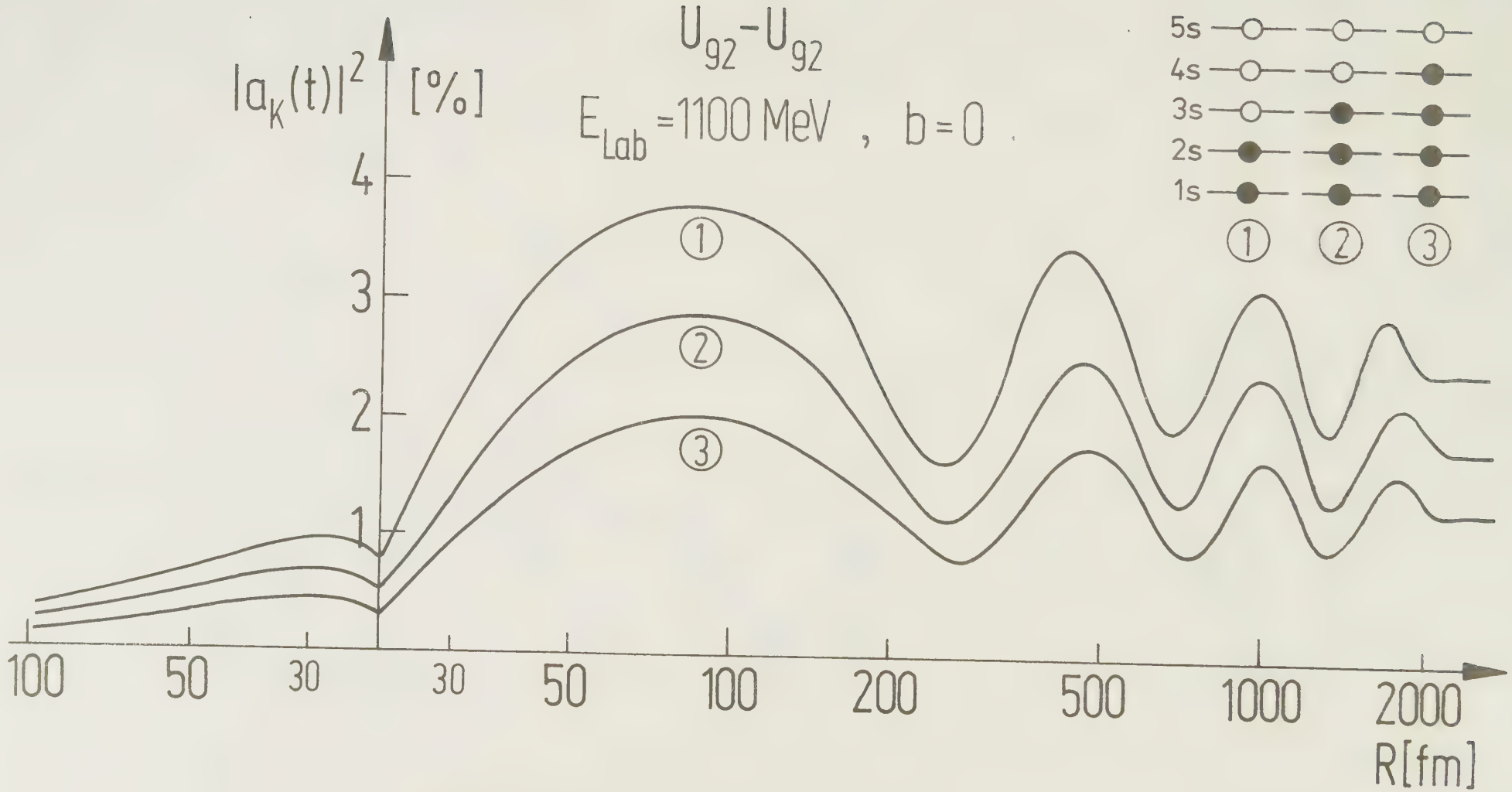

$U_{92}-U_{92}$
E_{Lab}=1100 MeV , b=0
$|a_K(t)|^2$ [%]
4
3
2
1
①
②
③
5s
4s
3s
2s
1s
100
50
30
30
50
100
200
500
1000
2000
R[fm]

Fig.7


$U_{92}-U_{92}$
$E_{Lab}=1100$ MeV , b=0
$|a_K(t)|^2$ [%]
4
3
2
1
①
②
③
5s
4s
3s
2s
1s
100
50
30
30
50
100
200
500
1000
2000
R[fm]
Fig.8

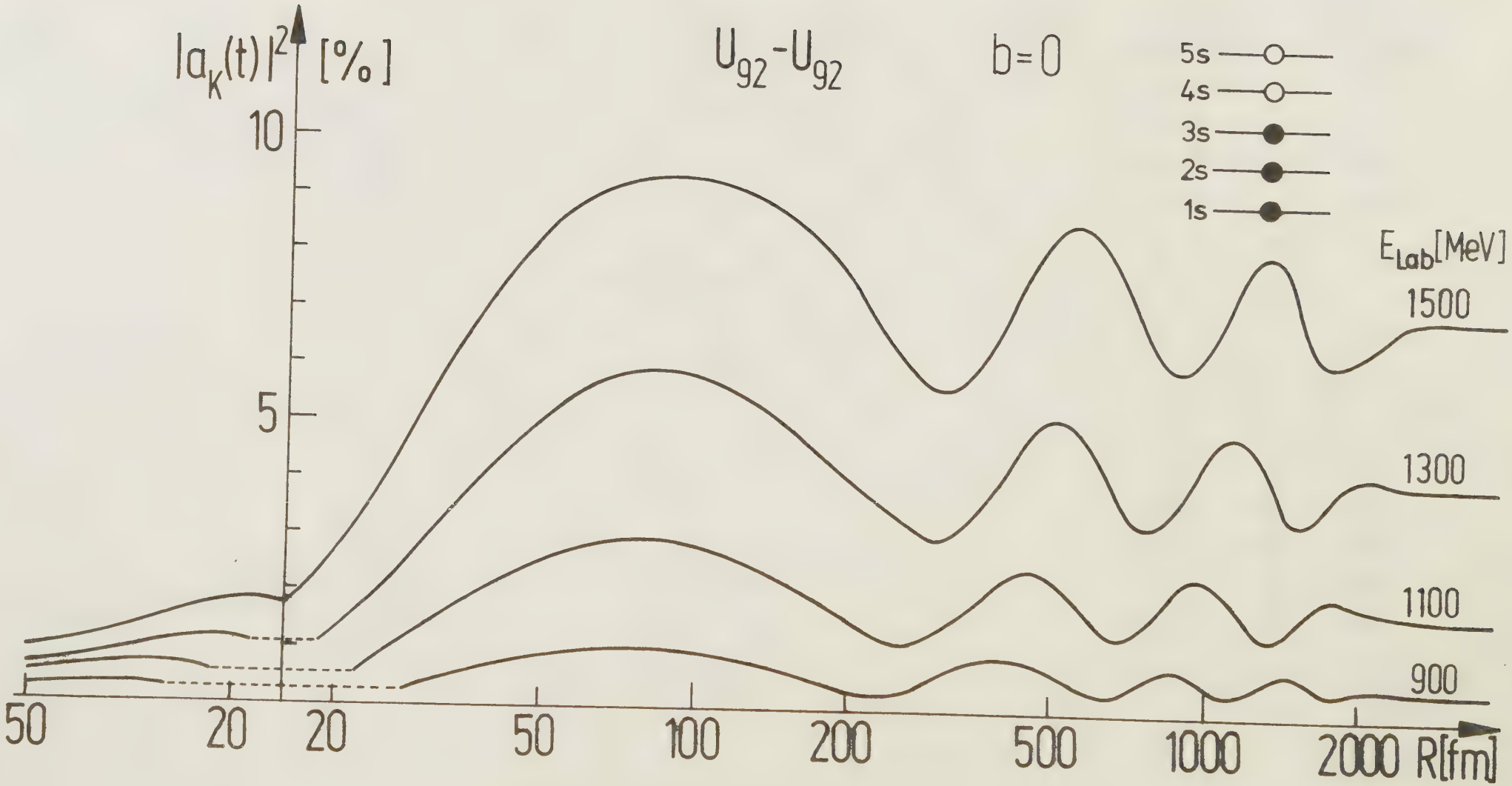

$|a_K(t)|^2$ [%]
U_{92}-U_{92}
b=0
5s
4s
3s
2s
1s
E_{Lab}[MeV]
1500
1300
1100
900
10
5
50
20
20
50
100
200
500
1000
2000
R[fm]

Fig.9

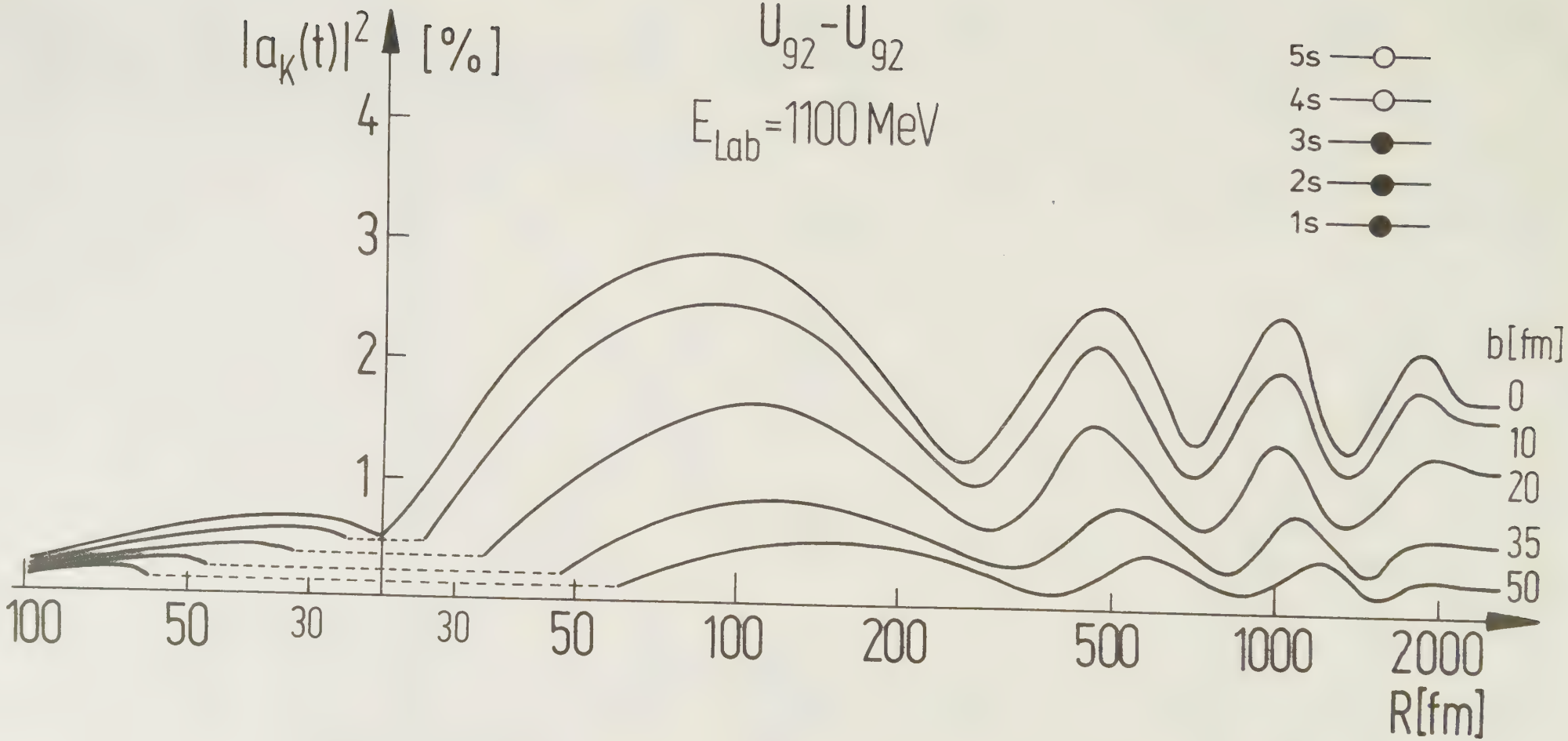

$|a_K(t)|^2$ [%]
$U_{92}-U_{92}$
E_{Lab}=1100 MeV
5s
4s
3s
2s
1s
b[fm]
0
10
20
35
50
4
3
2
1
100
50
30
30
50
100
200
500
1000
2000
R[fm]

Fig.10

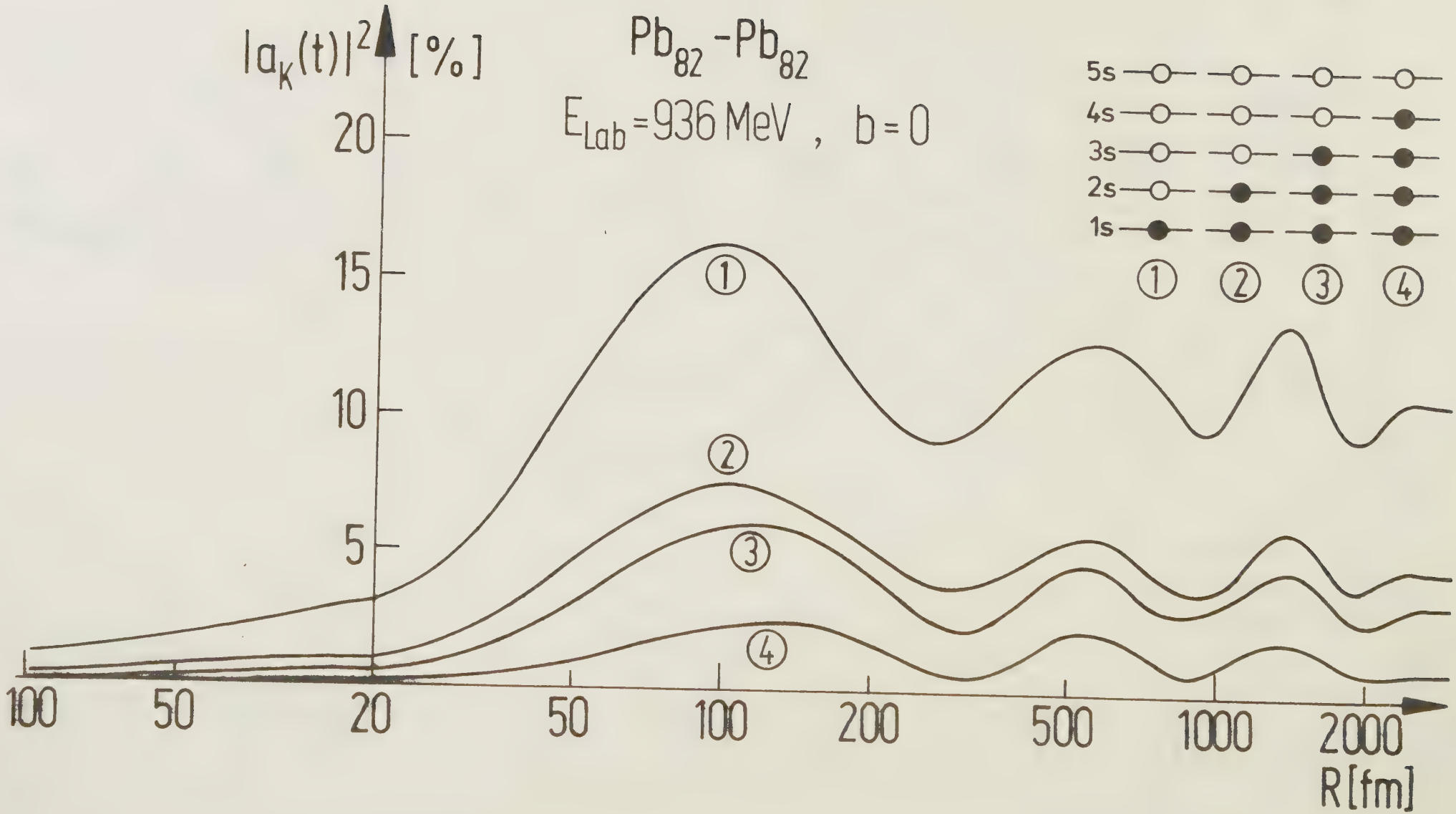

$|a_K(t)|^2$ [%]
$Pb_{82}-Pb_{82}$
$E_{Lab}=936$ MeV , b = 0
20
15
10
5
5s
4s
3s
2s
1s
1
2
3
4
100
50
20
50
100
200
500
1000
2000
R[fm]

Fig.11

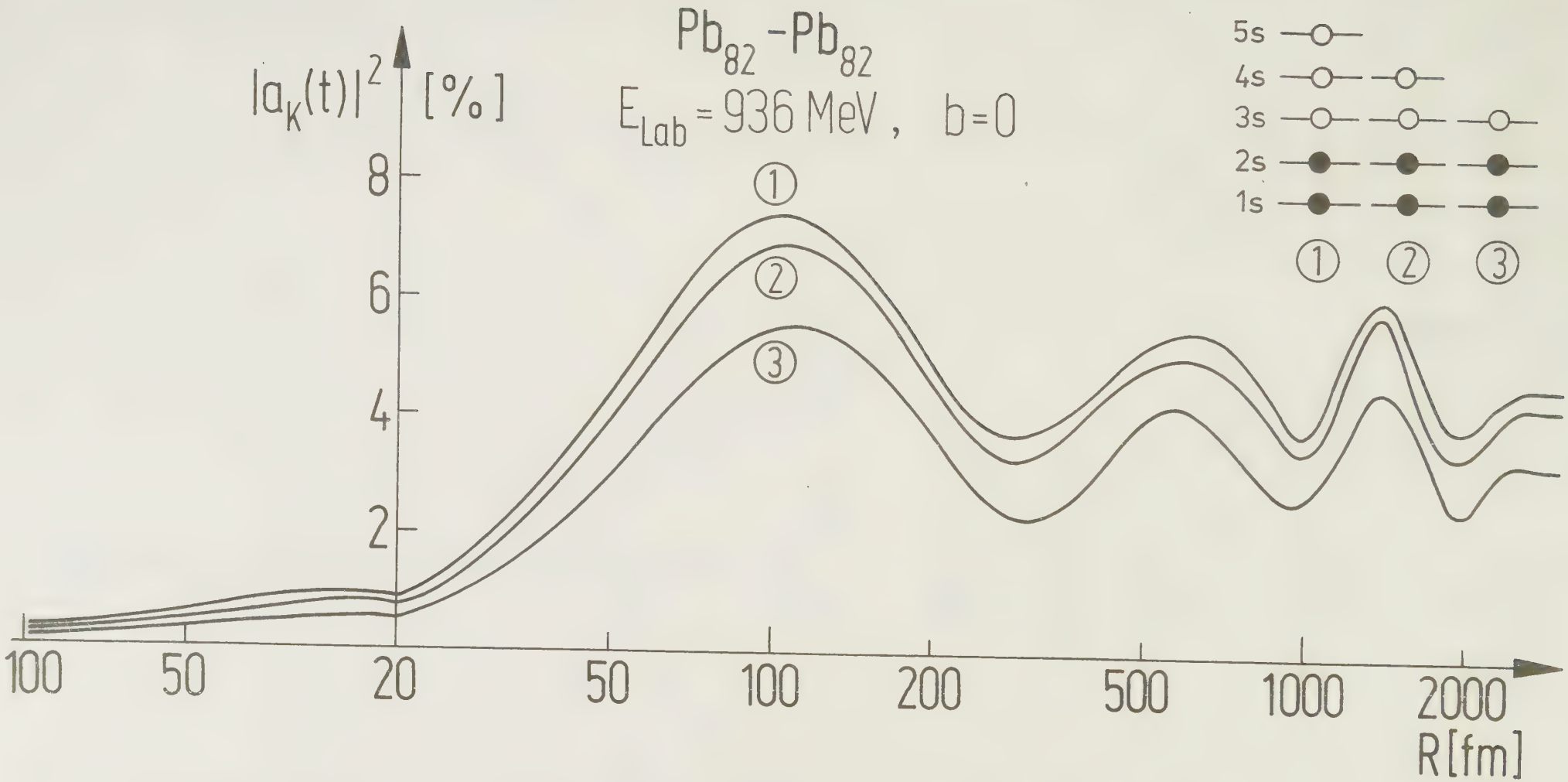

$Pb_{82}-Pb_{82}$
$E_{Lab} = 936$ MeV , b=0
$|a_K(t)|^2$ [%]
8
6
4
2
①
②
③
5s
4s
3s
2s
1s
100
50
20
50
100
200
500
1000
2000
R[fm]

Fig.12

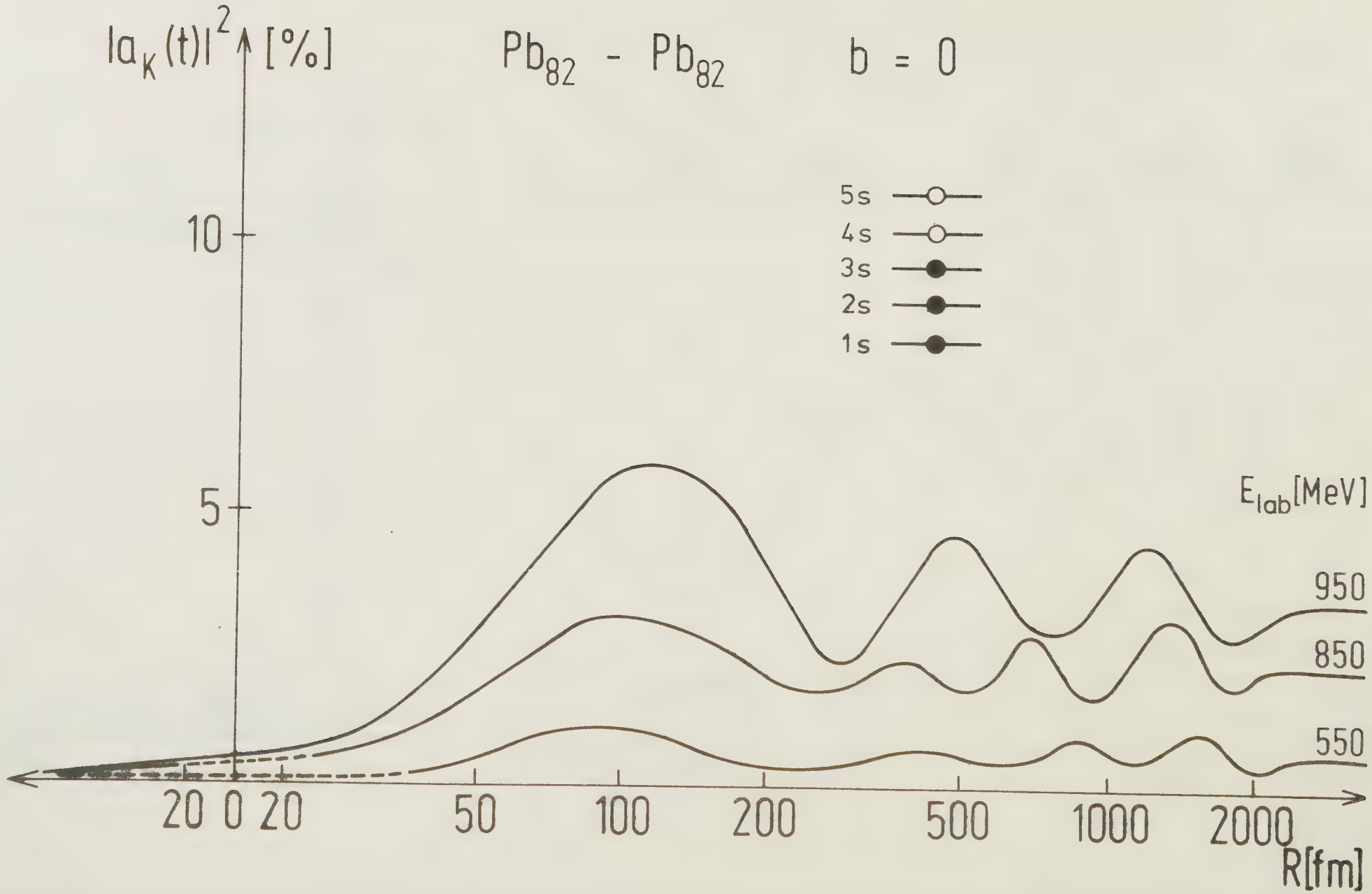

$|a_K(t)|^2$ [%]
Pb_{82} - Pb_{82}
b = 0
5s
4s
3s
2s
1s
10
5
E_{lab}[MeV]
950
850
550
20 0 20
50
100
200
500
1000
2000
R[fm]

Fig.13

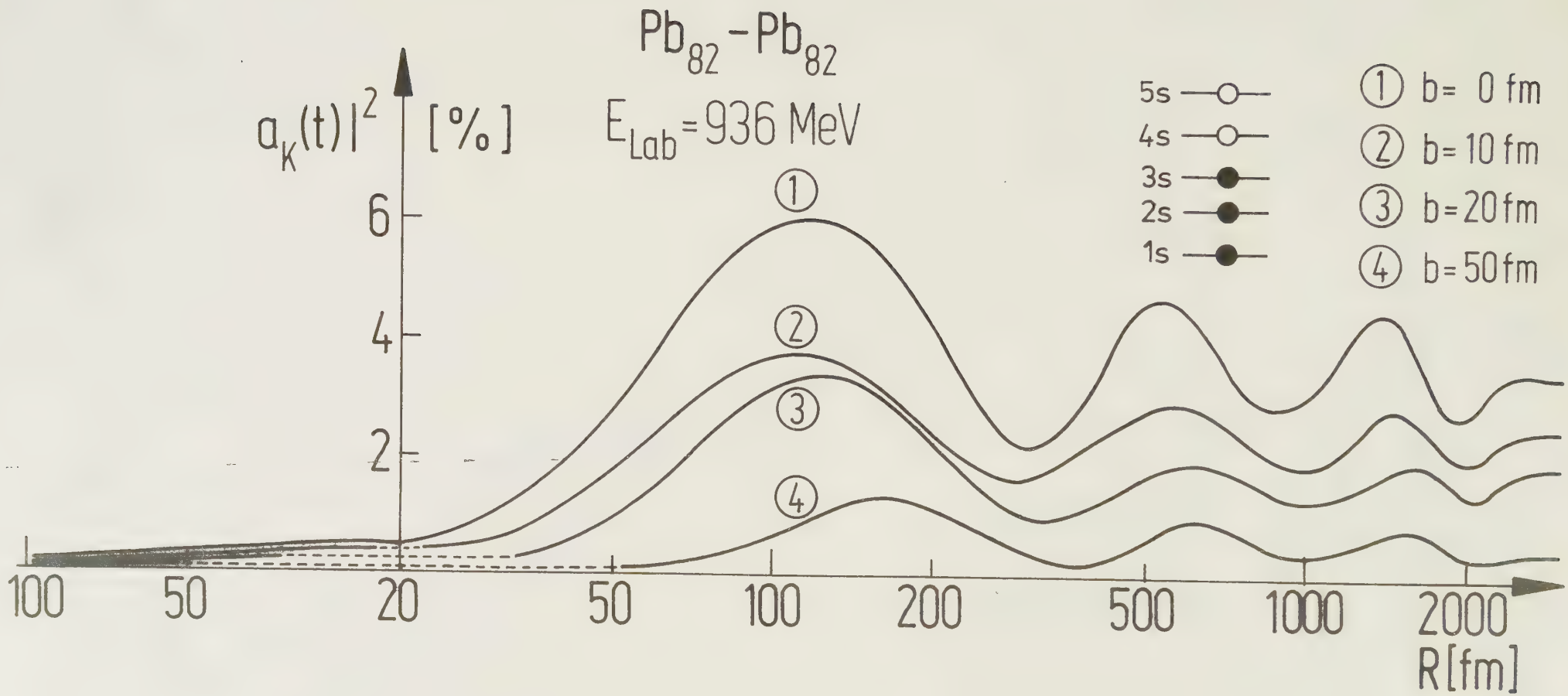

Pb82 - Pb82
ELab = 936 MeV
ak(t)|2 [%]
6
4
2
5s
4s
3s
2s
1s
① b= 0 fm
② b= 10 fm
③ b= 20 fm
④ b= 50 fm
100
50
20
50
100
200
500
1000
2000
R[fm]

Fig.14

$|a_K(\infty)|^2$ [%]
$U_{92}-U_{92}$
b = 0
K-Loch Wahrscheinlichkeit
5s
4s
3s
2s
1s
10
1.0
10^{-1}
10^{-2}
10^{-3}
0
500
1000
1500
E_{Lab} [MeV]

Fig.15

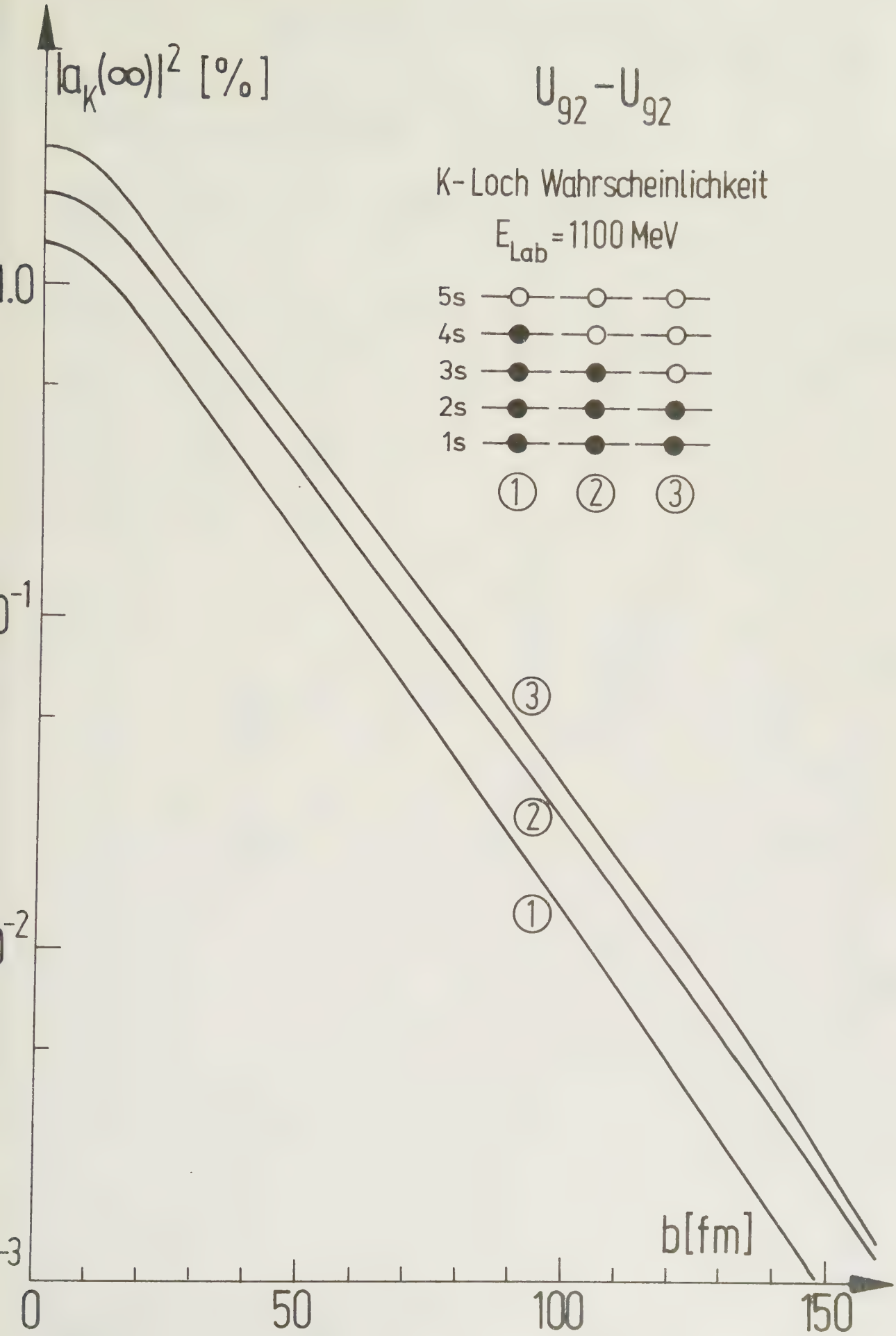

$|a_K(\infty)|^2$ [%]
$U_{92}-U_{92}$
K-Loch Wahrscheinlichkeit
E_{Lab} = 1100 MeV
5s
4s
3s
2s
1s
1
2
3
1.0
10^{-1}
10^{-2}
10^{-3}
b[fm]
0
50
100
150

Fig.16

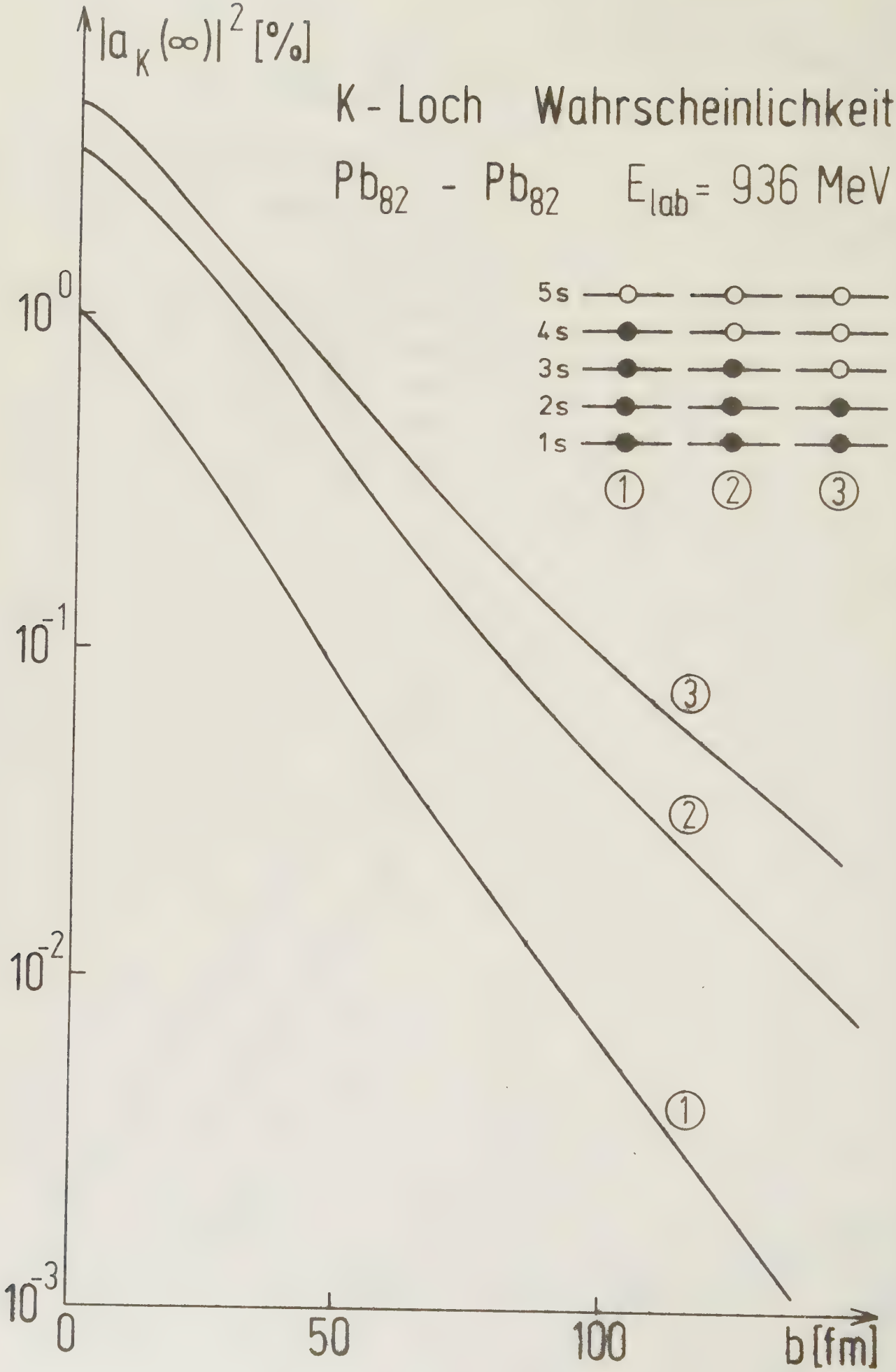

$|a_K(\infty)|^2$ [%]
K - Loch Wahrscheinlichkeit
Pb_{82} - Pb_{82} E_{lab} = 936 MeV
5s
4s
3s
2s
1s
1
2
3
10^0
10^{-1}
10^{-2}
10^{-3}
0
50
100
b [fm]

Fig.17

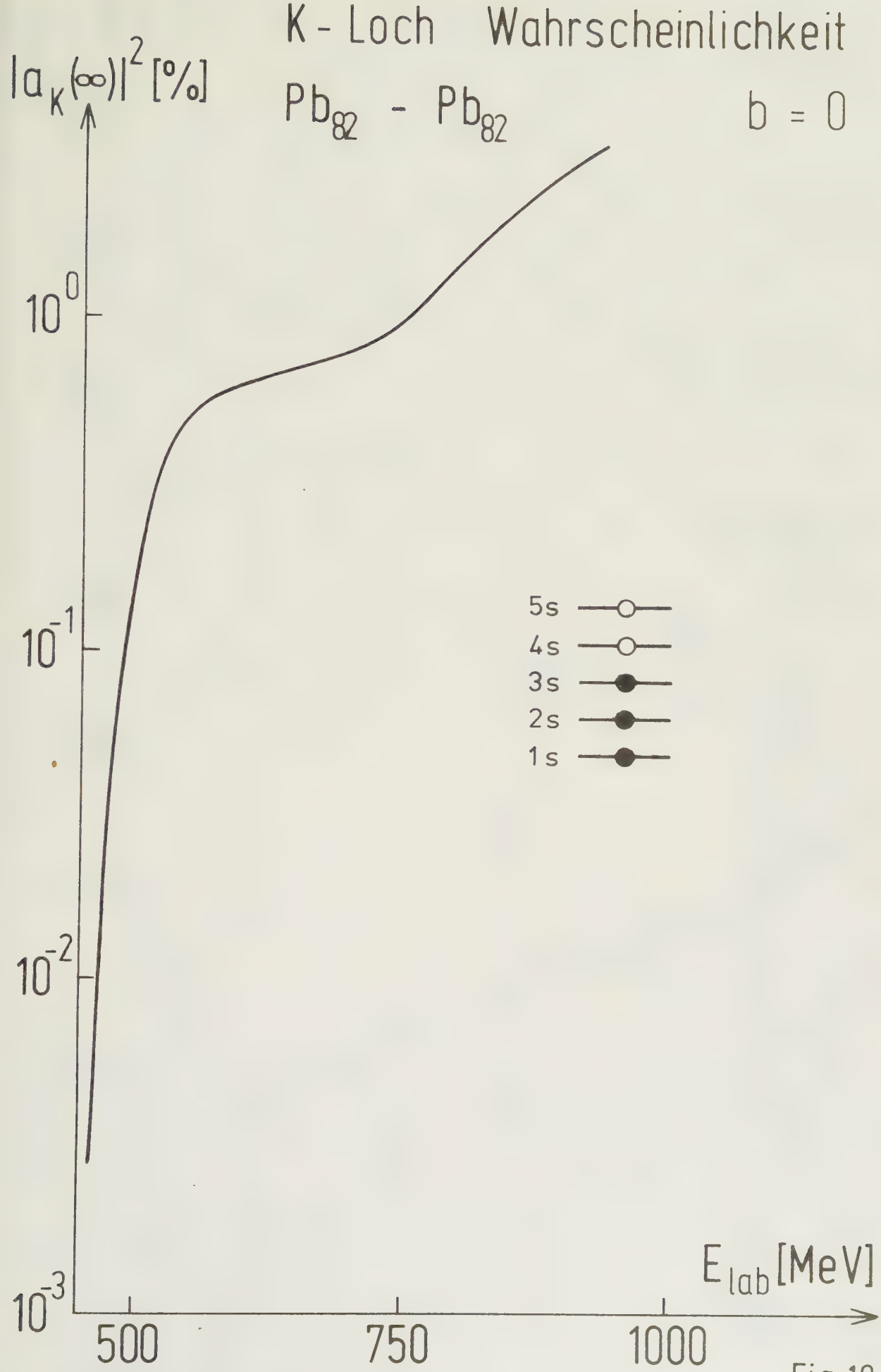

K - Loch Wahrscheinlichkeit
Pb_{82} - Pb_{82}
b = 0
$|a_K(\infty)|^2$ [%]
10^0
10^{-1}
10^{-2}
10^{-3}
5s
4s
3s
2s
1s
E_{lab} [MeV]
500
750
1000

Fig.18

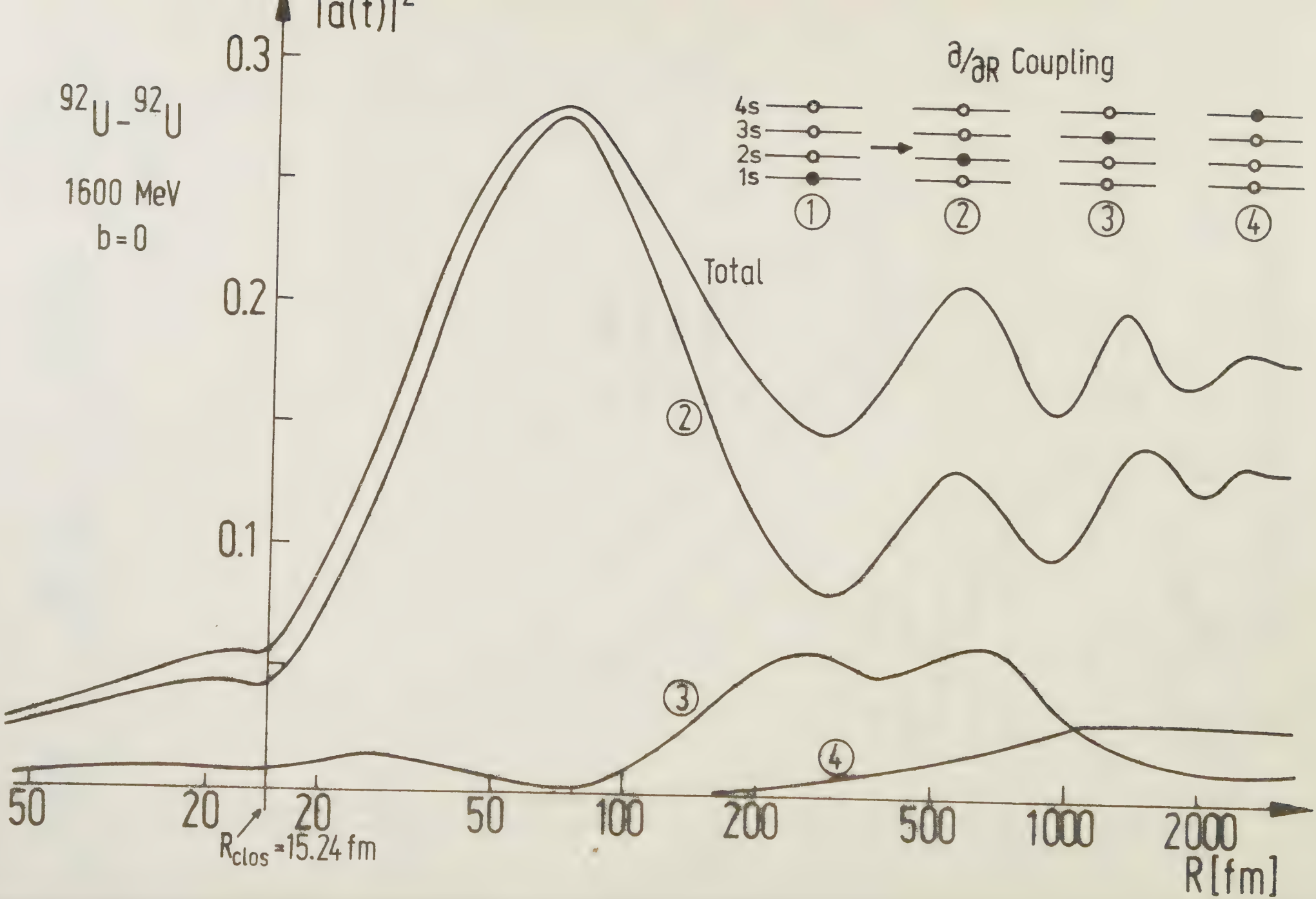

$|a(t)|^2$
0.3
0.2
0.1
$^{92}U - ^{92}U$
1600 MeV
b = 0
∂/∂R Coupling
4s
3s
2s
1s
①
②
③
④
Total
②
③
④
50
20
20
50
100
200
500
1000
2000
R_{clos} = 15.24 fm
R [fm]

Fig.10a

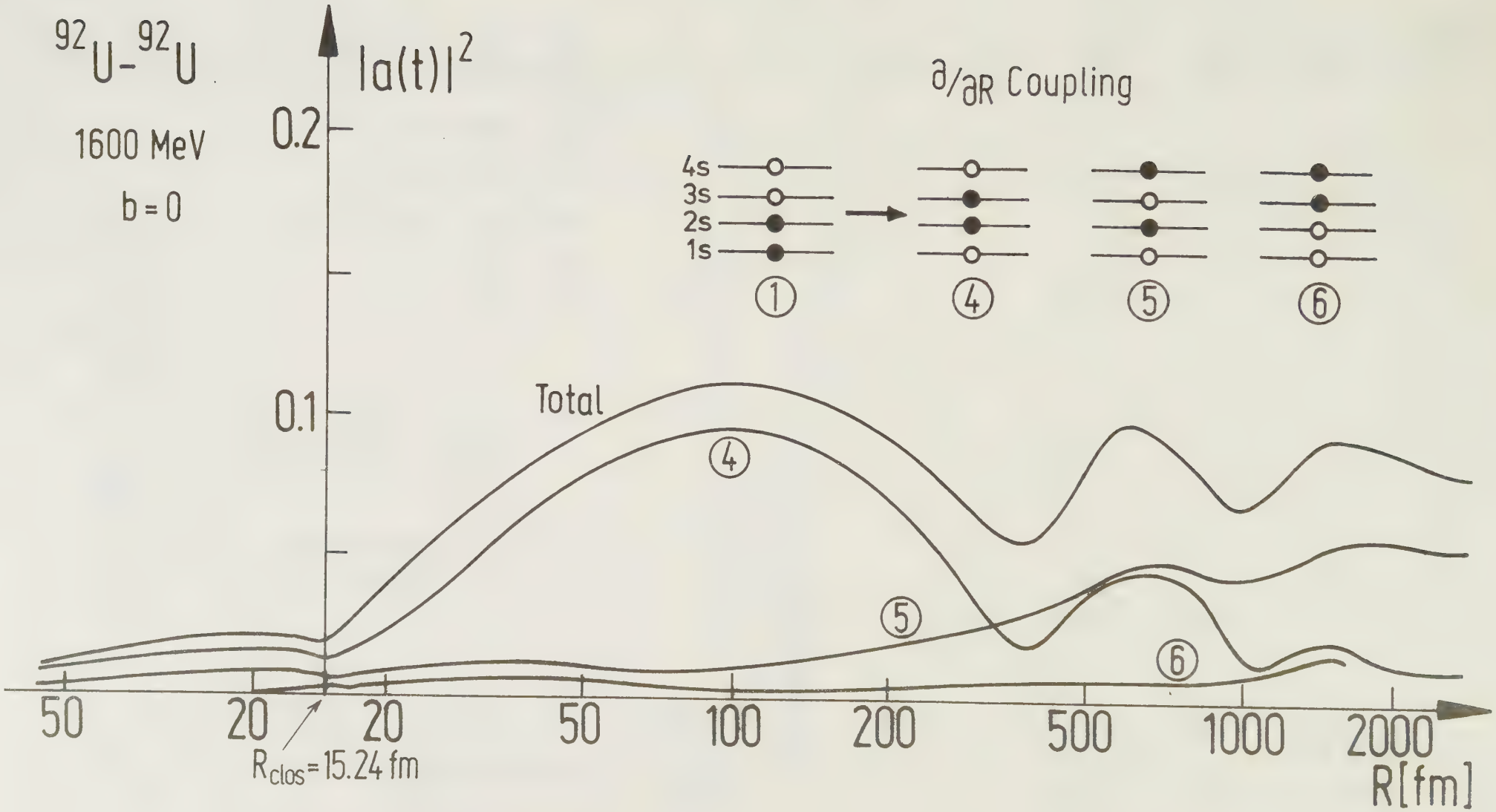

$^{92}U-^{92}U$
1600 MeV
b = 0
$|a(t)|^2$
0.2
0.1
∂/∂R Coupling
4s
3s
2s
1s
①
④
⑤
⑥
Total
④
⑤
⑥
50
20
20
50
100
200
500
1000
2000
R_{clos} = 15.24 fm
R[fm]

Fig.19b

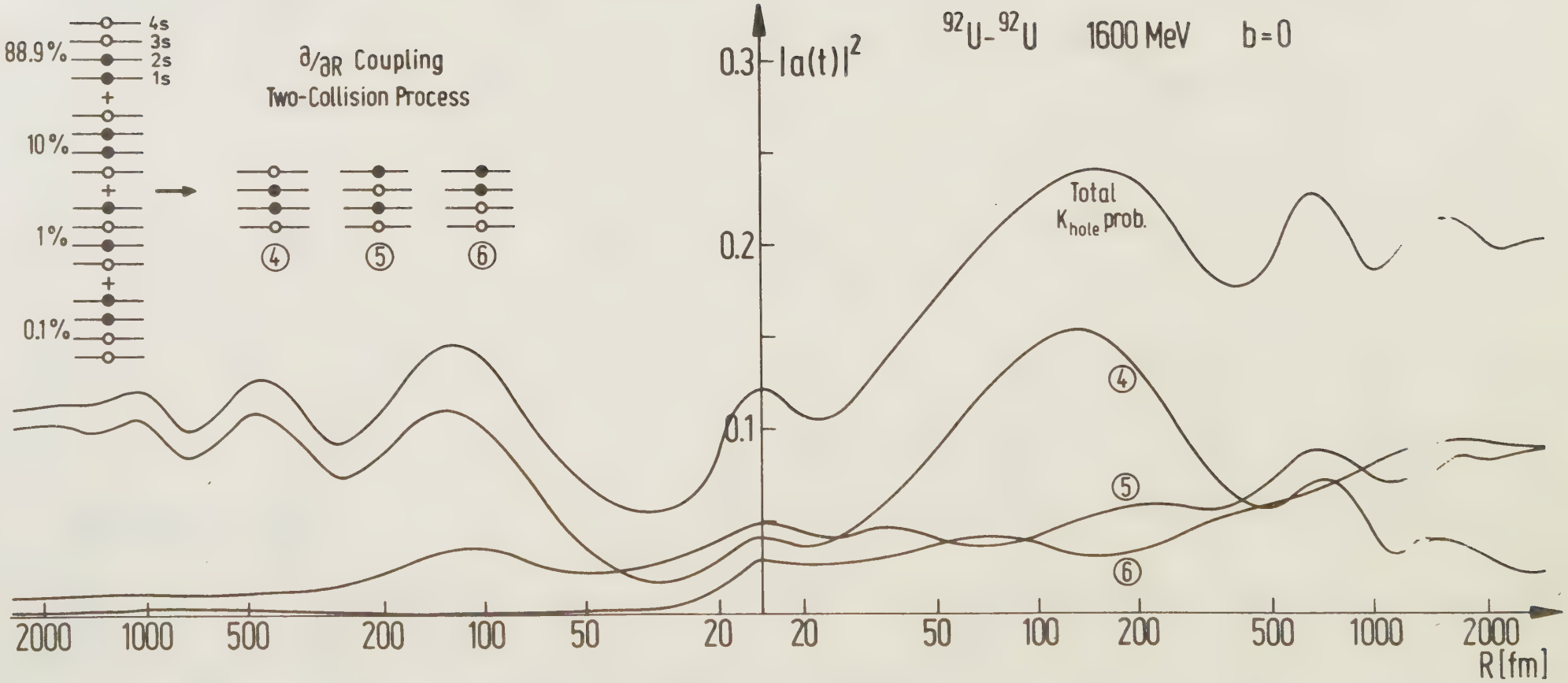

4s
3s
2s
1s
88.9%
10%
1%
0.1%
∂/∂R Coupling
Two-Collision Process
④
⑤
⑥
$^{92}U-^{92}U$ 1600 MeV b=0
$|a(t)|^2$
0.3
0.2
0.1
Total
K_{hole} prob.
2000
1000
500
200
100
50
20
20
50
100
200
500
1000
2000
R [fm]

Fig. 19 c

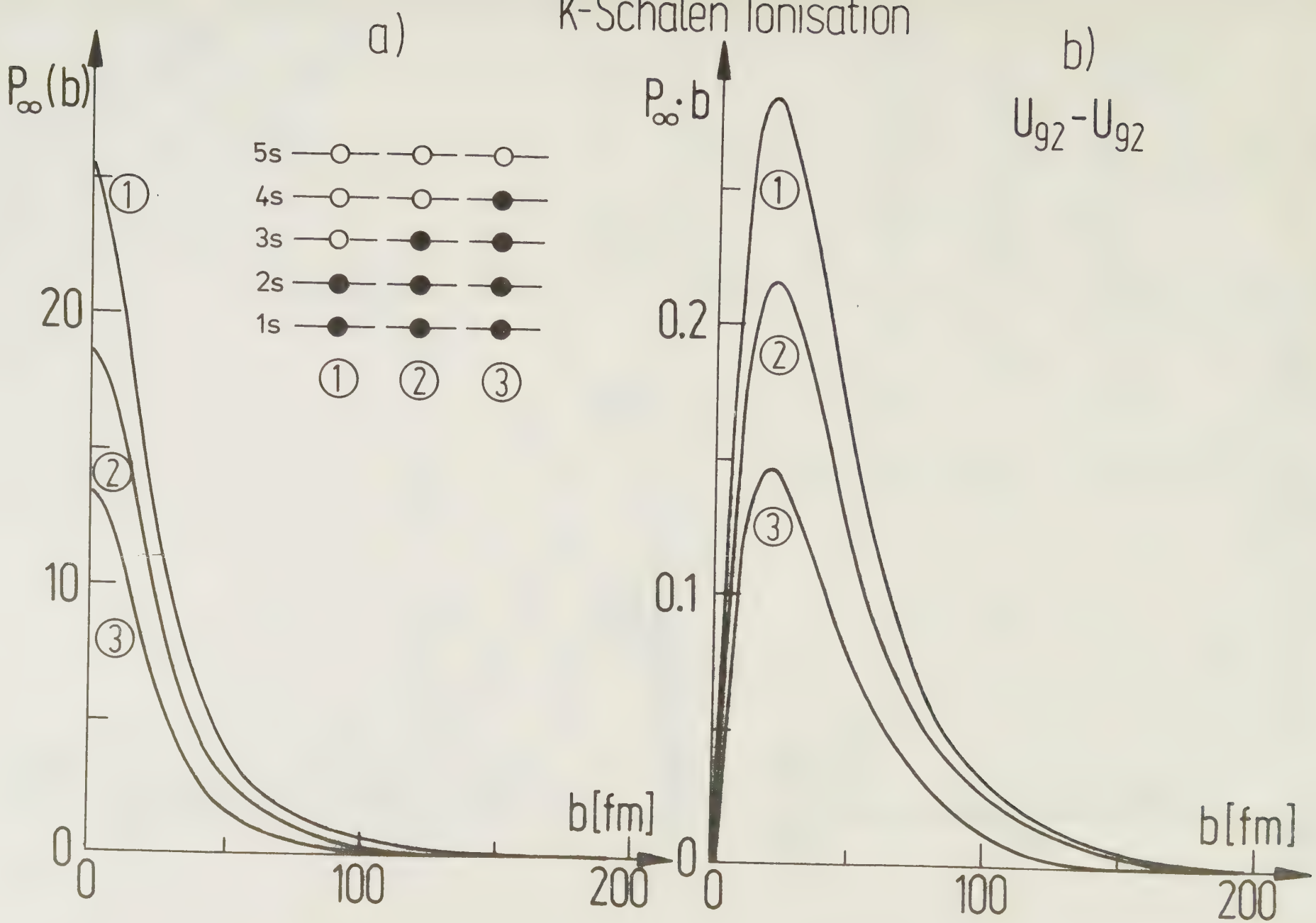

K-Schalen Ionisation
a)
$P_\infty(b)$
20
10
0
0
100
200
b[fm]
5s
4s
3s
2s
1s
1
2
3
b)
$U_{92}-U_{92}$
$P_\infty \cdot b$
0.2
0.1
0
0
100
200
b[fm]

Fig.20

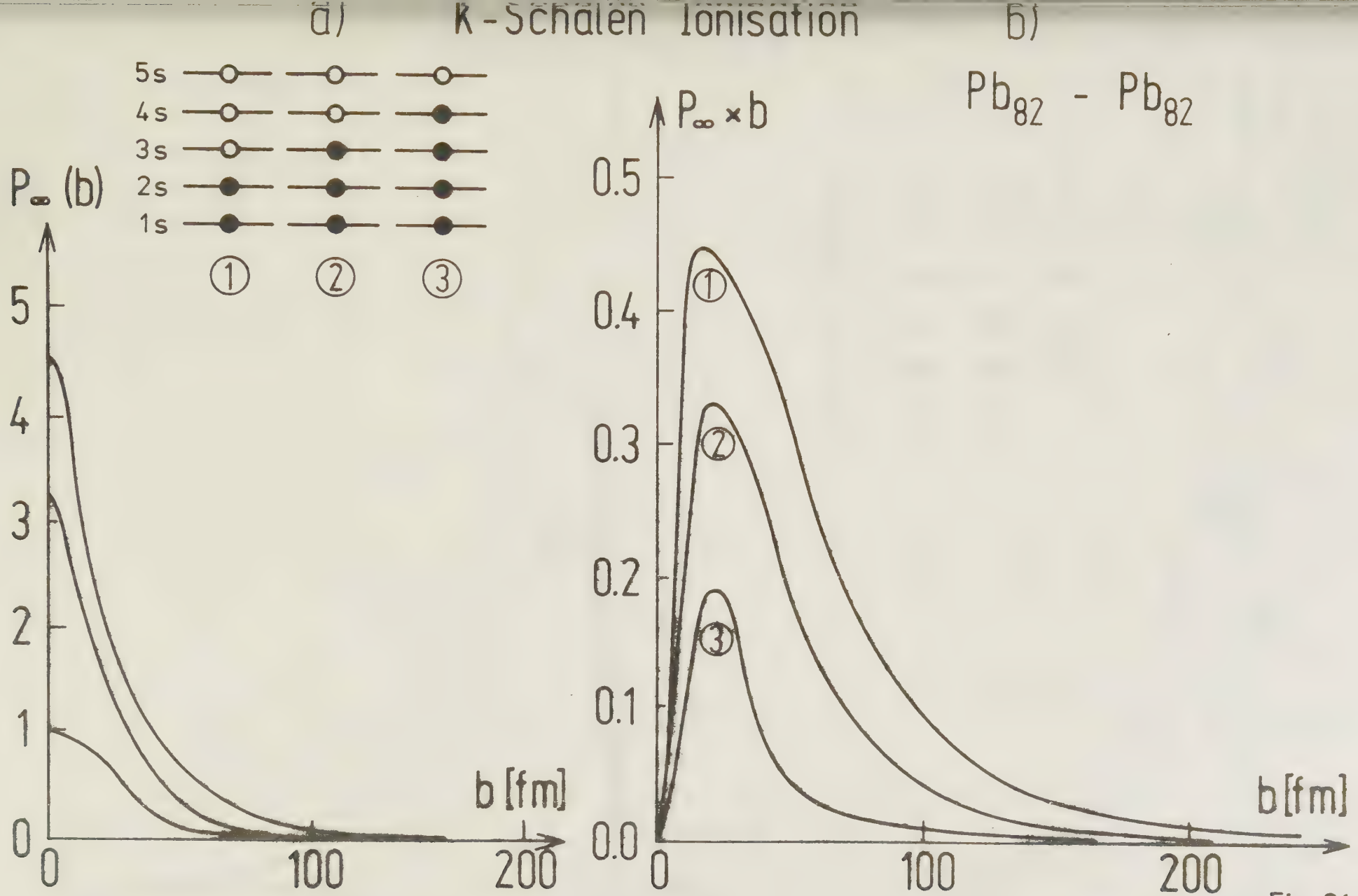

a)
K-Schalen Ionisation
b)
5s
4s
3s
2s
1s
①
②
③
P_∞ (b)
5
4
3
2
1
0
0
100
200
b [fm]
$P_\infty \times b$
Pb_{82} - Pb_{82}
0.5
0.4
0.3
0.2
0.1
0.0
0
100
200
b [fm]

Fig.21

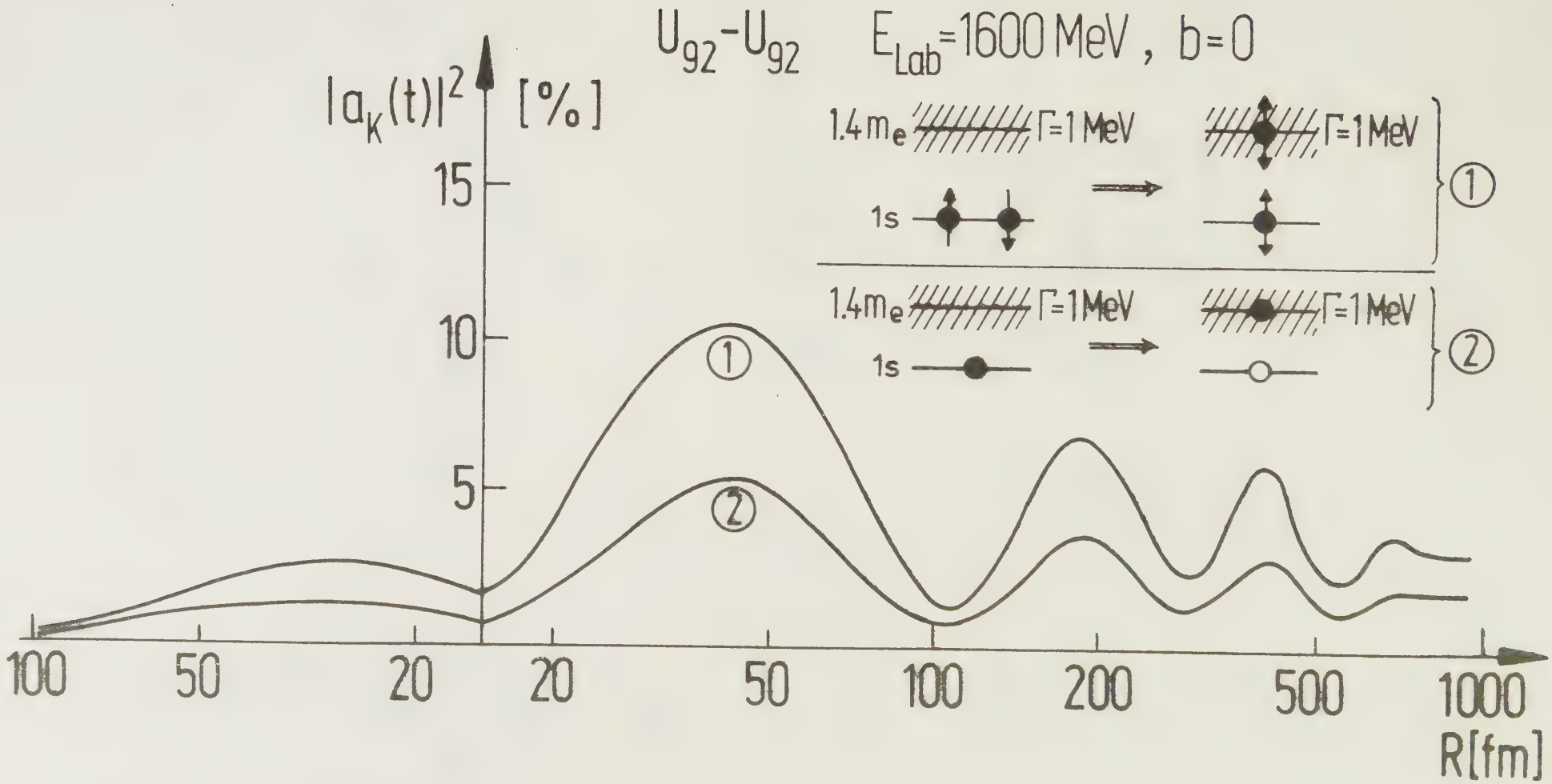

U92-U92
ELab=1600 MeV , b=0
|ak(t)|2 [%]
15
10
5
1.4me
Γ=1 MeV
1s
1
2
100
50
20
20
50
100
200
500
1000
R[fm]

Fig.22

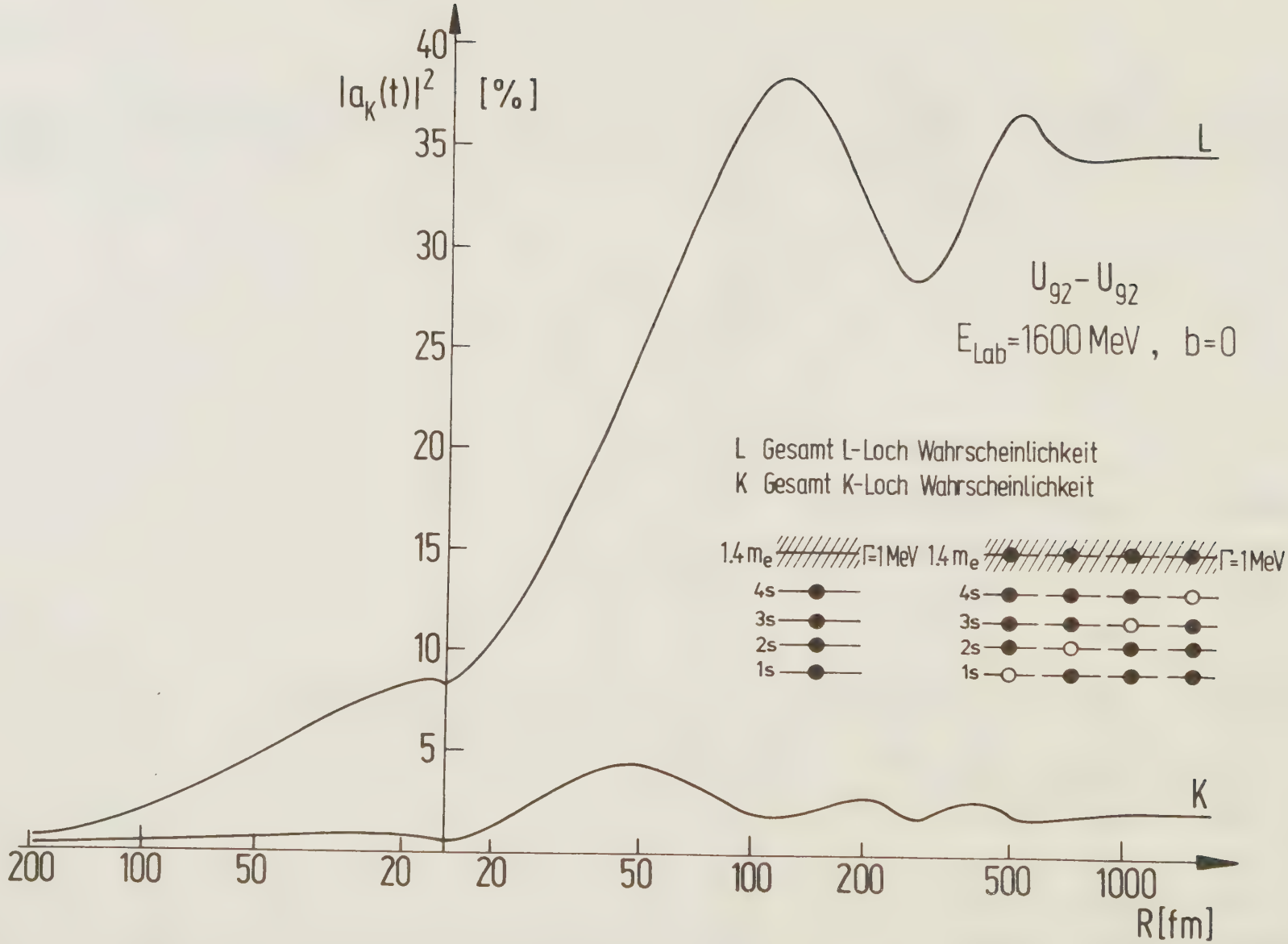

$|a_K(t)|^2$ [%]
40
35
30
25
20
15
10
5
L
K
$U_{92}-U_{92}$
E_{Lab}=1600 MeV , b=0
L Gesamt L-Loch Wahrscheinlichkeit
K Gesamt K-Loch Wahrscheinlichkeit
1.4 m_e
Γ=1 MeV
1.4 m_e
Γ=1 MeV
4s
3s
2s
1s
4s
3s
2s
1s
200
100
50
20
20
50
100
200
500
1000
R[fm]

Fig.23

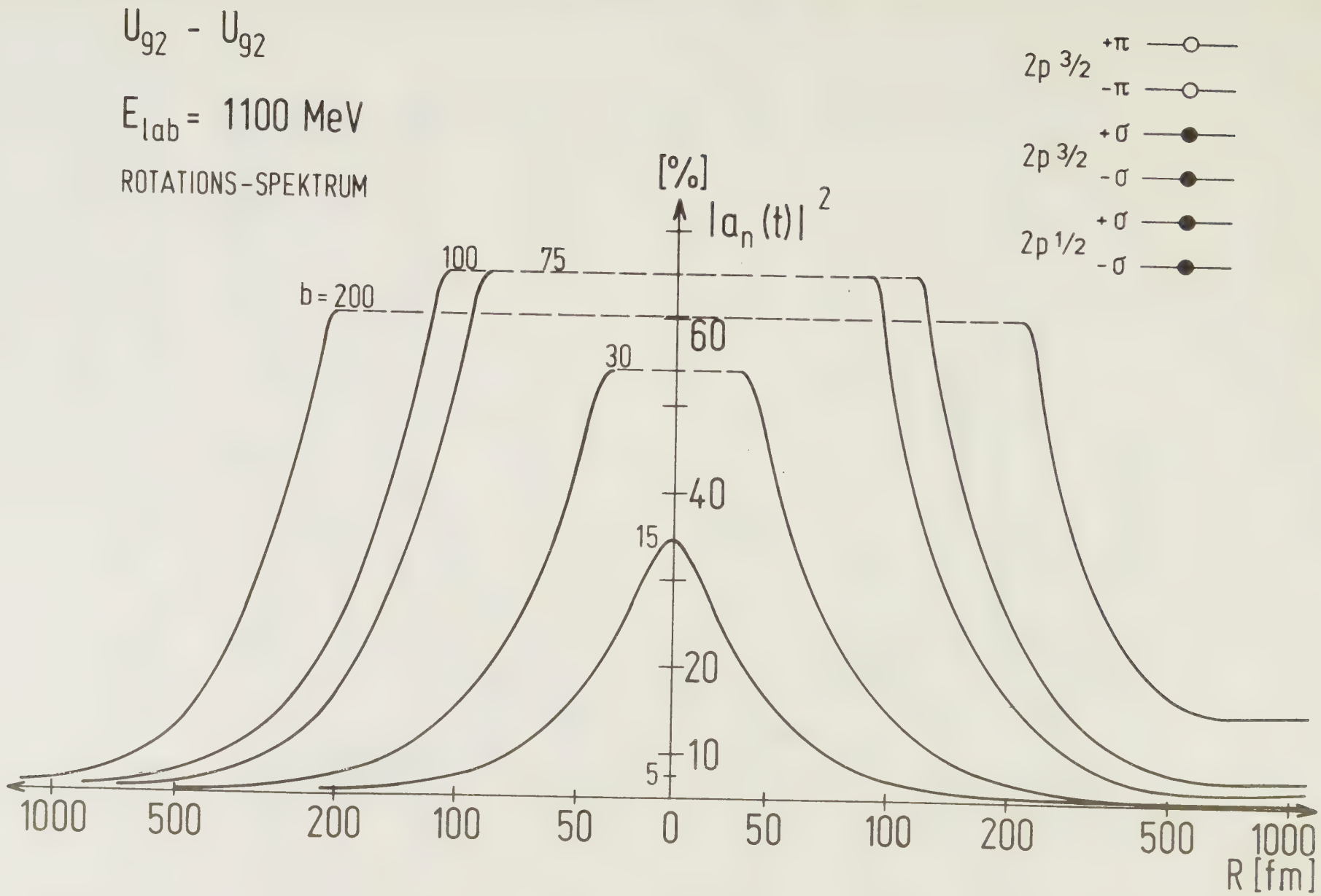

U92 - U92
Elab = 1100 MeV
ROTATIONS-SPEKTRUM
[%]
|an(t)|2
2p 3/2 +π
-π
2p 3/2 +σ
-σ
2p 1/2 +σ
-σ
b = 200
100
75
30
15
60
40
20
10
5
1000
500
200
100
50
0
50
100
200
500
1000
R [fm]

Fig. 24

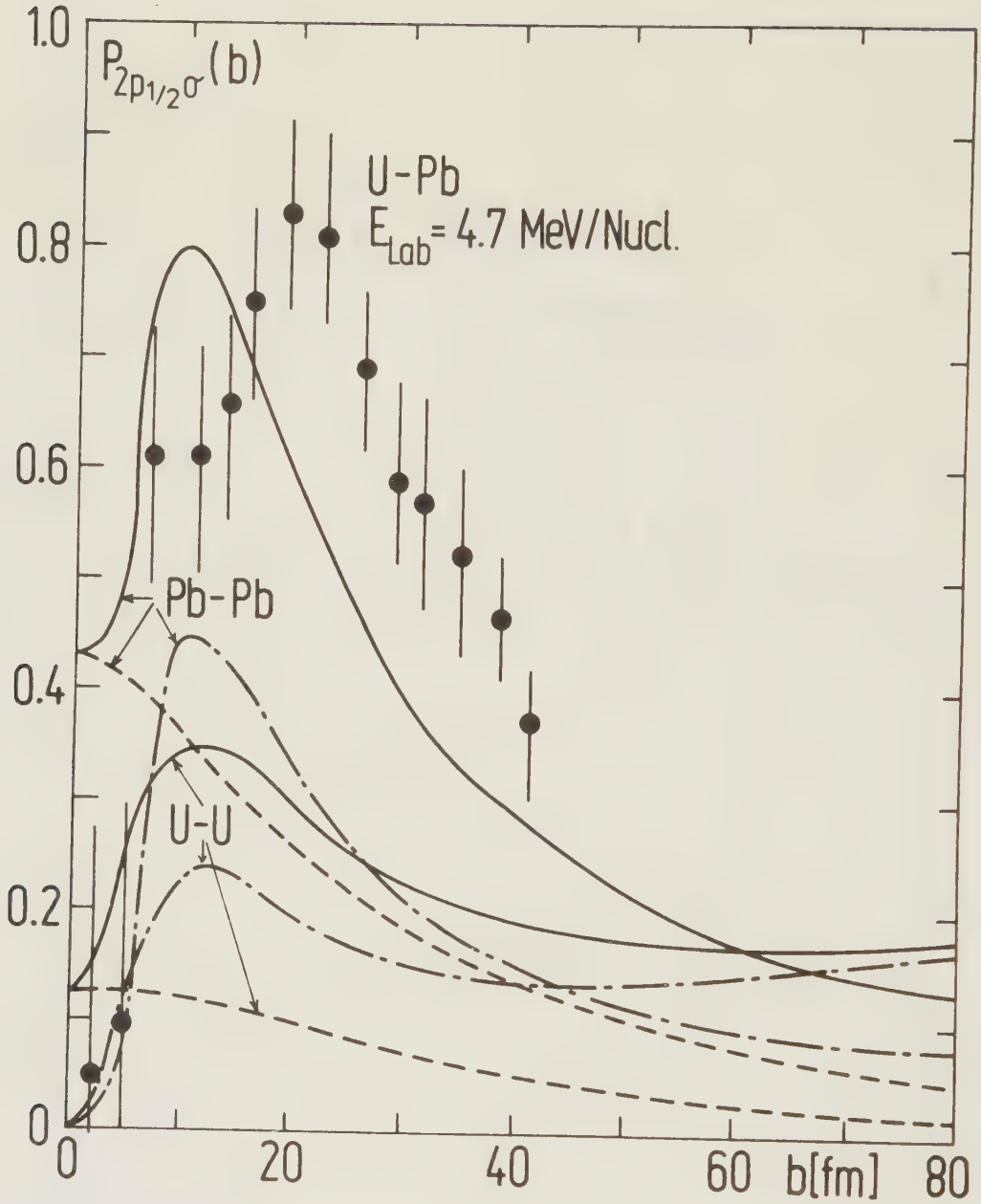

1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0
$P_{2p_{1/2}\sigma}(b)$
U-Pb
E_{Lab}= 4.7 MeV/Nucl.
Pb-Pb
U-U
0
20
40
60
b[fm]
80

Fig.25

Danksagung

Meinem Lehrer, Herrn Prof. Dr. Walter Greiner danke ich für die Anregung, Unterstützung und starkes Interesse an dieser Arbeit.

Mein Dank gilt auch Herrn Prof. Dr. Berndt Müller, der durch wertvolle Diskussionen und Ratschläge die Arbeit entscheidend beeinflußte.

Herrn Wilfried Betz danke ich für fruchtbare Diskussionen. Er stellte mir dankenswerter Weise auch seine Zwei-Zentren-Rechnungen für die Energiediagramme und Matrixelemente zur Verfügung.

Bei den Herren Dr. Gerhard Soff und Dr. R. Kent Smith möchte ich mich für ihre Zusammenarbeit und das Überlassen von Computer-Codes und Zeichnungen bedanken.

Frau Utschig und Frau Roth danke ich für das Anfertigen der Zeichnungen, Herrn Brose für den Druck der Arbeit.

Das Rechenzentrum der Gesellschaft für Schwerionenforschung (GSI) in Darmstadt und das zentrale Recheninstitut der Universität Frankfurt/M stellte die benötigte Rechenzeit zur Verfügung.

Besonderen Dank schulde ich meiner Mutter für ihr großes Verständnis in den letzten Jahren für meine Arbeit und ihre mannigfache Unterstützung.

Meine akademischen Lehrer waren:

Herr Prof. Dr. Greiner, Herr Prof. Dr. Scheid, Herr Prof. Dr. Müser, Herr Prof. Dr. Martienssen, Herr Prof. Dr. Köthe, Herr Prof. Dr. Kummer, Herr Prof. Dr. Schopper, Frau Prof. Dr. Reichert, Herr Prof. Dr. Bass, Herr Prof. Dr. Stelzer, Herr Prof. Dr. Dänzer, Herr Prof. Dr. Schwarz, Herr Prof. Dr. Gerhardt, Herr Prof. Dr. Czerny, Herr Prof. Dr. Gerritzen, Herr Prof. Dr. Stummel, Herr Prof. Dr. Doiwa, Herr Prof. Dr. König, Herr Prof. Dr. Royen, Herr Prof. Dr. Thompson, Herr Prof. Dr. Ziman, Dr. Pollard, Mr. Gibbs, Dr. Hillier, Dr. Cottingham, Dr. Greenwood, Dr. Guyan, Dr. Malos, Dr. Devonshire, Dr. Gyorffy

Lebenslauf

Am 28.10.1949 wurde ich als Sohn des kaufmännischen Angestellten Peter Heiligenthal und seiner Ehefrau Maria, geb. Schmidt in Frankfurt am Main geboren. Von Ostern 1956 bis Ostern 1960 besuchte ich die Volksschule in Frankfurt-Sachsenhausen. Dann wechselte ich zum Freiherr-vom-Stein Gymnasium in Frankfurt-Sachsenhausen, wo ich im Juni 1968 das Abitur ablegte. Im Wintersemester 1968 immatrikulierte ich mich an der Johann Wolfgang Goethe-Universität in Frankfurt am Main für die Fächer Physik und Mathematik. Im Oktober 1970 legte ich die Diplomvorprüfung für Physiker ab. Von Herbst 1971 bis Sommer 1972 führte ich mein Physikstudium als "post graduate student" an der University of Bristol, Großbritannien, weiter. Im Herbst 1972 begann ich unter Anleitung von Professor Dr. W. Greiner meine Diplomarbeit im Institut für theoretische Physik/Frankfurt . Im Oktober 1974 bestand ich die Diplomhauptprüfung für Physiker. Seit dieser Zeit bin ich an diesem Institut als wissenschaftlicher Angestellter beschäftigt.